THESE DE DOCTORAT D'ETAT

présentée à

L'UNIVERSITE DE PARIS VII

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR ES SCIENCES

Spécialité: Physique du Solide

par

Gérard SCHREDER

Sujet: CONTRIBUTION A L'ETUDE DE L'EFFET TUNNEL DANS LES SEMICONDUCTEURS

Soutenue le : 24 mars 1972 devant la Commission d'Examen

MM. P. NOZIERES : Président

P. AIGRAIN
E. GUYON
A. LIBCHABER
} Examinateurs

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41549227_0032

THESE DE DOCTORAT D'ETAT

présentée à

L'UNIVERSITE DE PARIS VII

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR ES SCIENCES

Spécialité: Physique du Solide

par

Gérard SCHREDER

Sujet: CONTRIBUTION A L'ETUDE DE L'EFFET TUNNEL DANS LES SEMICONDUCTEURS

Soutenue le : 24 mars 1972 devant la Commission d'Examen

MM. P. NOZIERES : Président

P. AIGRAIN
E. GUYON
A. LIBCHABER
} Examinateurs

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

" I tunneled through and
I finally made it ..."

heard from the man in the street

Que la première personne du pluriel ne soit pas entendue comme un pluriel de majesté, mais comme le simple reflet de la réalité. L'essentiel de ce travail fut réalisé par deux personnes dont les contributions respectives sont bien souvent indiscernables.

Ce travail a été effectué, pour sa plus grande part, au laboratoire E.R.G. de la Radiotechnique-Compelec et aux Laboratoires d'Electronique et de Physique appliquée sous la responsabilité de R. Veilex. Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de ma reconnaissance pour la confiance qu'il m'a accordée sans relâche.

Mes remerciements s'adressent tout particulièrement

- à P. Guétin en compagnie duquel cette étude a été menée de bout en bout dans la plus complète sympathie ;

- à E. Guyon pour ses nombreuses suggestions, la qualité de ses conseils et le dynamisme avec lequel il a personnellement contribué à cette recherche ;

- à P. Nozières de nous avoir associés à ses travaux personnels et d'avoir guidé les nôtres en leur communiquant une rigueur nouvelle ;

- à R. Combescot avec lequel l'étude théorique exposée ici a été réalisée.

Je tiens également à remercier J.P. Hurault, J. Klein, A. Léger, A. Libchaber et A. Zylbersztejn de m'avoir, par de fréquentes conversations, apporté un concours fructueux.

Je désire enfin exprimer ma gratitude envers R. Duchesne et M. Nelson-Pauthier pour la qualité et l'initiative de leur assistance technique et envers D. Leclair qui a bien voulu assurer la frappe de ce mémoire.

Si je sais gré à Julie, mon épouse, de m'avoir supporté pendant la durée de ce travail, je préfère lui souhaiter humour et courage pour continuer a le faire pendant de longues années.

TABLE DES MATIERES

	page
INTRODUCTION	1
GENERALITES	3
I - METHODES EXPERIMENTALES	
I - 1. Préparation des échantillons	7
I - 2. Méthodes de caractérisation	8
I - 3. Mesures électriques	10
I - 4. Cryogénie	13
II - ETUDE DU BACKGROUND	
II - 1. Généralités	15
II - 2. Méthodes de calcul	17
II - 3. Caractéristiques générales de la résistance différentielle	19
II - 4. Résultats expérimentaux	20
II - 5. Conclusions	28
III - INTERACTIONS	
III - 1. Généralités	31
III - 2. Phonons du métal normal	32
III - 3. Phonons de bord de zone de Brillouin	33
III - 4. Phonons optiques de centre de zone	38
III - 5. Conclusions	43
IV - CALCUL DIRECT DU COURANT TUNNEL	
IV - 1. Rappel et formalisme général	45
IV - 2. Influence des fluctuations de potentiel	59
IV - 2.1. Processus intravallées	65
IV - 2.2. Processus intervallées	77
IV - 3. Influence de l'interaction électron-phonon	89
IV - 3.1. Processus intervallées	95
IV - 3.2. Processus intravallées	112
V - CONCLUSIONS	

.../...

APPENDICES

A - EXPRESSION DES FONCTIONS DE GREEN A-1
A - 1. Barrière carrée A-3
A - 2. Modèle WKB A-5
B - STRUCTURES DE PHONONS B-1
B - 1. Calcul sans déphasage B-2
B - 2. Calcul avec déphasage B-5
C - ESTIMATION DU POTENTIEL DES IMPURETES PAR PHOTOLUMINESCENCE C-1

REFERENCES

ANNEXE 1 : Quantitative Aspects of the Tunneling Resistance in n-GaAs Schottky Barriers.

ANNEXE 2 : Effects of an Ion Bombardment on the Characteristics of a Metal/n-GaAs Tunnel Contact.

INTRODUCTION

La première observation de l'effet tunnel dans les semiconducteurs a été effectuée en 1957 par L. Esaki [1]. L'existence d'une résistance différentielle négative dans une diode p-n fortement dopée en a constitué la preuve irréfutable. La recherche fondamentale sur les diodes "Esaki" s'est pratiquement éteinte vers les années 1960 pour laisser place aux études destinées à l'utilisation de ce phénomène dans des dispositifs électroniques. L'attention s'est alors reportée sur les contacts métal-semiconducteur (M.S.) dans lesquels l'effet tunnel à basse température a été mis en évidence en 1966 simultanément par deux groupes américains [2,3]. Si l'intérêt utilitaire de ce type de jonctions n'est pas apparu de façon évidente, par contre, les possibilités multiples d'études physiques qu'il ouvrait furent rapidement et amplement saisies. Il est clair, en effet, que le nombre de couples métal-semiconducteur utilisable est fort grand et que les conditions de préparation peuvent être variées a volonté.

A l'opposé des diodes p-n, les contacts M.S. présentent l'avantage essentiel de pouvoir être réalisés de façon contrôlée. Le matériau qui constitue la zone active d'une diode p-n est, par nature, essentiellement inhomogène et par là même difficile à caractériser avec précision. Les contacts M.S. par contre sont réalisés usuellement sur un matériau massif pratiquement homogène et dont les caractéristiques peuvent être déterminées avec précision à priori ou a postériori. Si la structure réelle de l'interface et celle de l'électrode métallique restent difficilement accessibles à la caractérisation, il est clair cependant que l'essentiel de la barrière tunnel est considérablement mieux connu que dans tout

.../...

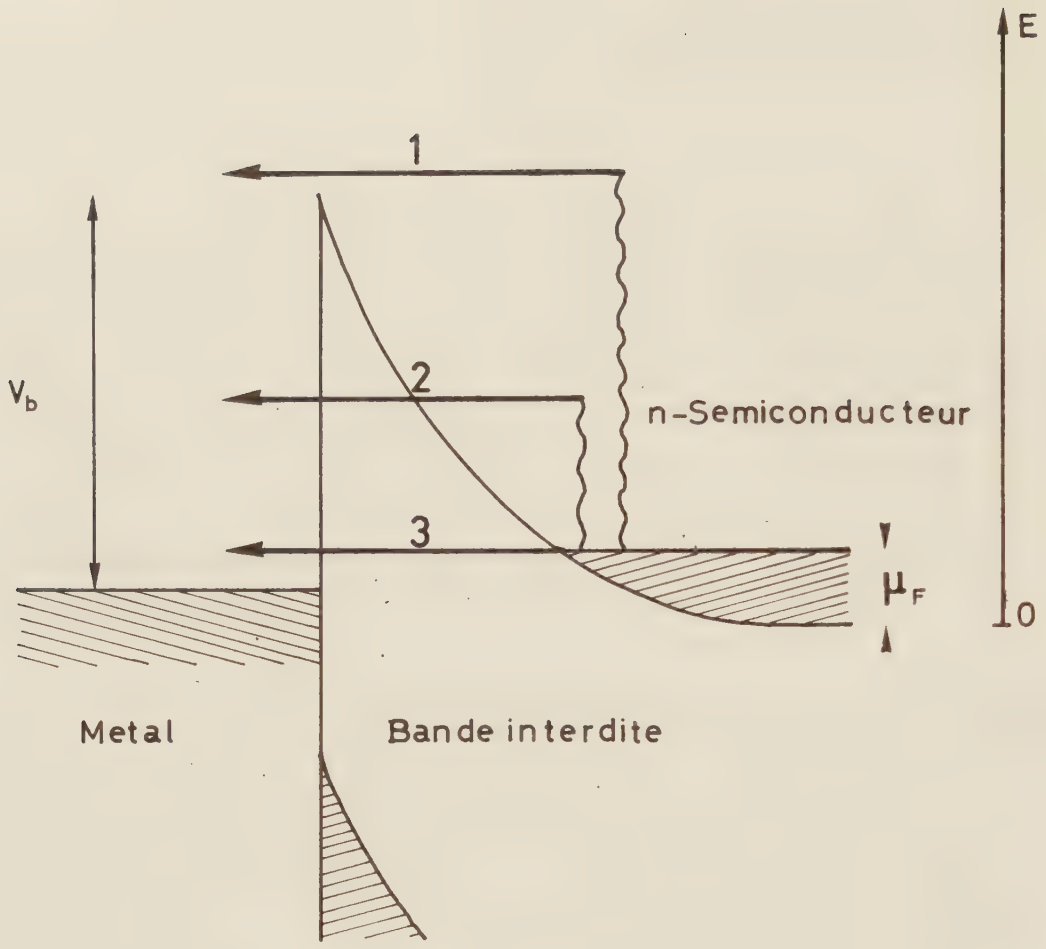
autre type de jonctions. La barrière M.S. représente de ce fait un outil d'intérêt considérable dans l'étude physique de l'effet tunnel lui-même ou celle des propriétés du semiconducteur.

L'intérêt que comportent ces structure s'est traduit de façon simultanée dans deux directions principales. D'une part, l'attention des chercheurs s'est portée sur l'interprétation de la forme et de la valeur quantitative de la conduction différentielle (background). D'autre part, le développement de la technique spectroscopique (d^2I/dV^2) a permis de mettre en évidence des "anomalies" de conductance dues pour bon nombre d'entre elles au fait que les électrons qui participent à l'effet tunnel ne sont pas libres mais interagissent avec leur environnement.

Ces deux directions expérimentales ont été accompagnées d'un effort théorique équivalent qui a permis d'interpréter parfois de façon quantitative les résultats. Dans bien des cas cependant, les approches théoriques, bien que variées, n'ont permis qu'une appréhension qualitative des résultats sans présenter pour autant une rigueur c'est-à-dire une crédibilité satisfaisante. Cette constatation s'applique essentiellement au traitement des interactions dans tous les types de jonctions tunnel. R. Jombescot a parfaitement exposé dans sa thèse [4] la situation récente de la théorie et a présenté une nouvelle approche dont la rigueur est exemplaire et sur laquelle nous reviendrons plus loin.

Nos travaux expérimentaux et théoriques sur l'effet tunnel dans les contact M.S. ont suivi les deux directions générales présentées plus haut, a savoir l'étude du background et celle des interactions. L'aspect quantitatif ayant constitué un objectif essentiel, nous nous sommes particulièrement attachés au contrôle et à la caractérisation des jonctions réalisées.

.../...



1 - Regime thermoionique

2 - Regime thermoionique assisté

3 - Regime tunnel

Figure 1

Les semiconducteurs utilisés ont été volontairement choisis parmi les plus connus sinon les plus simples. Nous nous sommes efforcés, sur ces matériaux , de faire varier les conditions expérimentales, c'est-à-dire les paramètres intervenant dans l'effet tunnel et par là même d'approfondir la compréhension fine des mécanismes tunnel. A la lumière de nos résultats expérimentaux et du modèle de C. Caroli et al.[5], il nous a semblé opportun de reprendre de façon générale et compacte la discussion de l'effet tunnel dans les barrières M.S. en présence d'interactions.

GENERALITES

Le contact entre un métal et un semiconducteur, parfois appelé barrière de Schottky, est usuellement représenté par un schéma énergétique analogue à celui de la figure 1. L'énergie totale des électrons est portée en ordonnée et l'abscisse représente la distance. L'ensemble de ce qui suit concerne les semiconducteurs de type n mais peut être aisément adapté aux semiconducteurs de type p. L'interface métal-semiconducteur est supposée idéale, c'est-à-dire abrupte, plane et chimiquement propre. Le niveau de Fermi à l'interface se trouve fixé quelque part à l'intérieur du gap du semiconducteur. Sa position est déterminée par deux facteurs essentiels :

- la différence de travaux de sortie des deux matériaux
- la présence d'états de surface.

L'influence respective de ces deux facteurs est loin d'être claire et la hauteur de barrière V_b ne peut être déterminée que par l'expérience en l'état actuel de nos connaissances.

.../...

La distribution d'impuretés ionisées dans le semiconducteur est assimilée à une distribution homogène. La forme du potentiel de la barrière peut alors en principe être calculée exactement. La barrière est approximativement parabolique dans toute la zone désertée par les porteurs libres du semiconducteur. Cette barrière de potentiel s'oppose au libre passage des électrons et l'on peut, suivant les conditions de dopage et de température, distinguer trois régimes de conduction [6] d'un tel contact :

- Le régime thermoionique dans lequel les électrons sont excités thermiquement au-dessus de la barrière (dopages faibles et/ou haute température);
- Le régime tunnel dans lequel les électrons traversent la barrière sans subir d'excitation thermique notable (dopages élevés et basse température) ;
- Le régime thermoionique assisté qui englobe tous les cas intermédiaires.

Le régime qui nous concerne est le second et pour les semiconducteurs habituels, les conditions généralement adoptées sont les suivantes :

- semiconducteurs dégénérés : $10^{18} \lesssim n \lesssim 10^{20}$ cm^{-3}
- hauteur de barrière : $0,6 \lesssim V_b \lesssim 1,5$ eV
- température : $0,8 \lesssim T \lesssim 4,2$ °K.

De cette façon les résistances de contact obtenues varient typiquement de 0,1 à 10^5 Ω.

Les semiconducteurs sur lesquels nous rapportons l'essentiel de nos résultats sont de type n : GaAs, Ge, GaSb. Dans la mesure du possible nous avons fait varier la hauteur de barrière et le niveau de dopage. La méthode la plus puissante que nous ayons utilisée pour faire varier les caractéristiques des contacts a consisté a appliquer une forte pression hydrostatique aux échantillons. La pression entraîne une modification importante de la structure de bandes. Nous avons donc étudié d'une part des semiconducteurs à gap direct (GaAs) et à gap indirect (Ge). D'autre part, les expériences sous pression nous ont permis

.../...

d'investiguer sur un même corps (GaSb) ces deux configurations de bande et d'observer avec précision les phénomènes apparaissant lors de la transition gap direct - gap indirect. Cette technique s'est avérée riche en informations aussi bien sur le background que sur les interactions. La méthode expérimentale et l'ensemble des résultats concernant les expériences sous pression font l'objet de la thèse de P. Guétin. Seules seront rappelées ici les données nécessaires à la comparaison entre théorie et expérience. Quelques résultats obtenus par d'autres expérimentateurs seront occasionnellement rapportés.

La seule méthode de préparation utilisée jusqu'à présent qui garantisse une définition physico-chimique suffisante de l'interface est celle du clivage sous ultravide. L'objectif choisi d'étudier l'effet tunnel quantitativement nous a donc imposé cette méthode de réalisation qui, comme nous le verrons plus loin, nous a permis d'atteindre une reproductibilité satisfaisante des caractéristiques tunnel.

Les méthodes expérimentales sont présentées dans la première partie. La seconde partie est consacrée à l'étude du background dans différentes situations expérimentales et a son interprétation dans les formulations classiques. Dans la troisième partie nous nous attacherons à présenter les effets dus aux interactions et à résumer les approches théoriques habituellement utilisées. Le formalisme rigoureux sera exposé dans la quatrième partie dans son application au contact métal-semiconducteur et les divers points soulevés précédemment seront repris de façon générale. Les mécanismes tunnel dans les semiconducteurs à gap indirect seront particulièrement approfondis.

.../...

Une étude concernant l'influence d'un bombardement ionique sur les caractéristiques d'effet tunnel a été menée parallèlement. Les résultats complets que nous ne discuterons pas dans cet exposé sont présentés en annexe II.

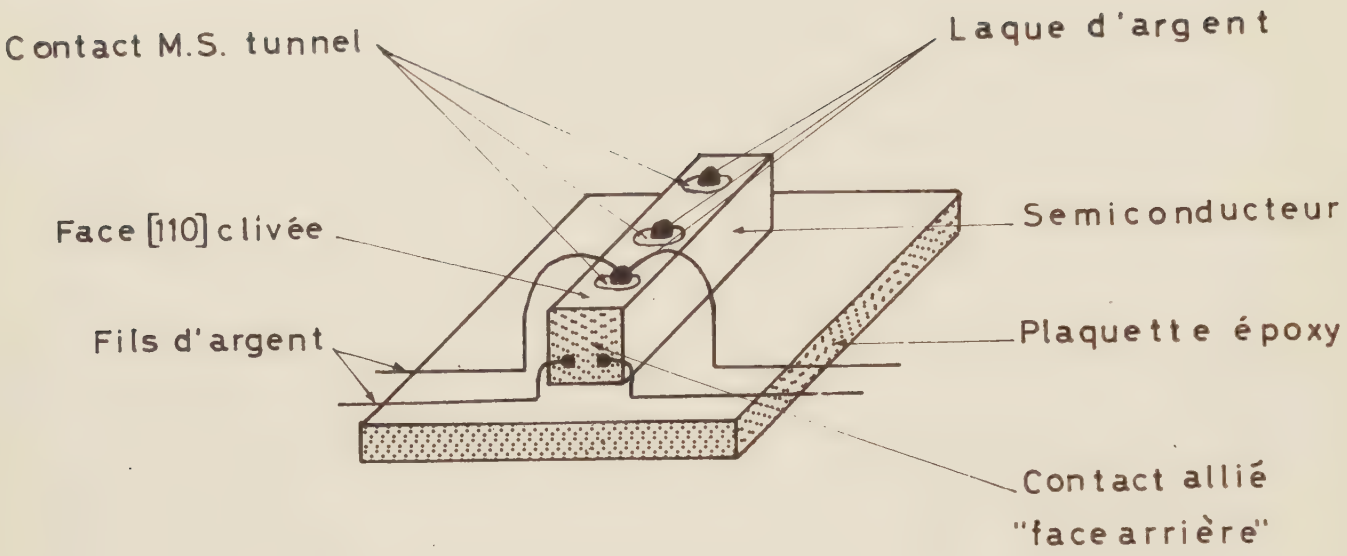


Figure 2

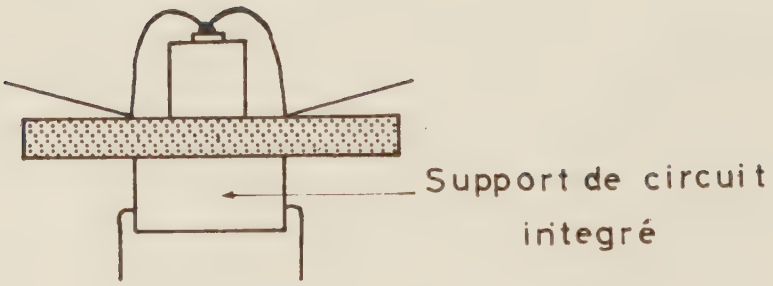


Figure 3

I METHODES EXPERIMENTALES

Les méthodes de réalisation et de caractérisation des contacts M.S. sont décrites en détail dans l'annexe I et nous nous bornons ici à rappeler l'essentiel de ces techniques.

I - 1. Préparation des échantillons

L'opération consiste à cliver un barreau de semiconducteur dans le flux d'évaporation du métal devant constituer la contre-électrode. La pression résiduelle pendant le clivage est maintenue au-dessous de 5.10^{-9} torr, ce qui assure une propreté chimique de l'interface pratiquement parfaite. L'observation à l'aide d'un microscope optique permet de sélectionner les contacts réalisés sur les domaines de la surface qui comportent le moins de marches de clivage. Le GaAs et le GaSb sont clivés dans des plans (110) et le Ge dans un plan (111). L'épaisseur de la contre-électrode est typiquement quelques milliers d'angströms et les diamètres utilisés varient de 0,3 à 0,6 mm. Les contacts sur le semiconducteur sont réalisés par alliage avant mise sous vide et clivage. Sur la contre-électrode métallique les contacts sont assurés par une gouttelette de pâte à l'argent (figure 2). Les mesures sont effectuées à quatre fils dans le but d'éliminer la chute de tension. L'échantillon est alors monté sur une plaquette de résine époxy qui elle-même se trouve fixée sur un support de circuit intégré à 14 broches (figure 3). L'ensemble est emboité sur la queue de cryostat. A pression ordinaire, il est alors possible d'étudier cinq contacts M.S. en une seule descente à très basse température.

.../...

I - 2. Méthodes de caractérisation

Outre les paramètres du semiconducteur lui-même qui nous sont fournis de façon plus ou moins précise par la littérature, il importe de mesurer la concentration des porteurs avec soin et de s'assurer de son homogénéité. Ces mesures sont effectuées par effet Hall à 300°K et 77°K sur des échantillons découpés dans différentes régions du lingot et de façon systématique dans la zone adjacente aux contacts M.S.. Sauf exception, la valeur du niveau de dopage à l'endroit des contacts est alors connue à 10% près approximativement. Les matériaux utilisés sont fortement dégénérés et l'on peut considérer que la concentration de porteurs libres ne varie plus au-dessous de 77°K.

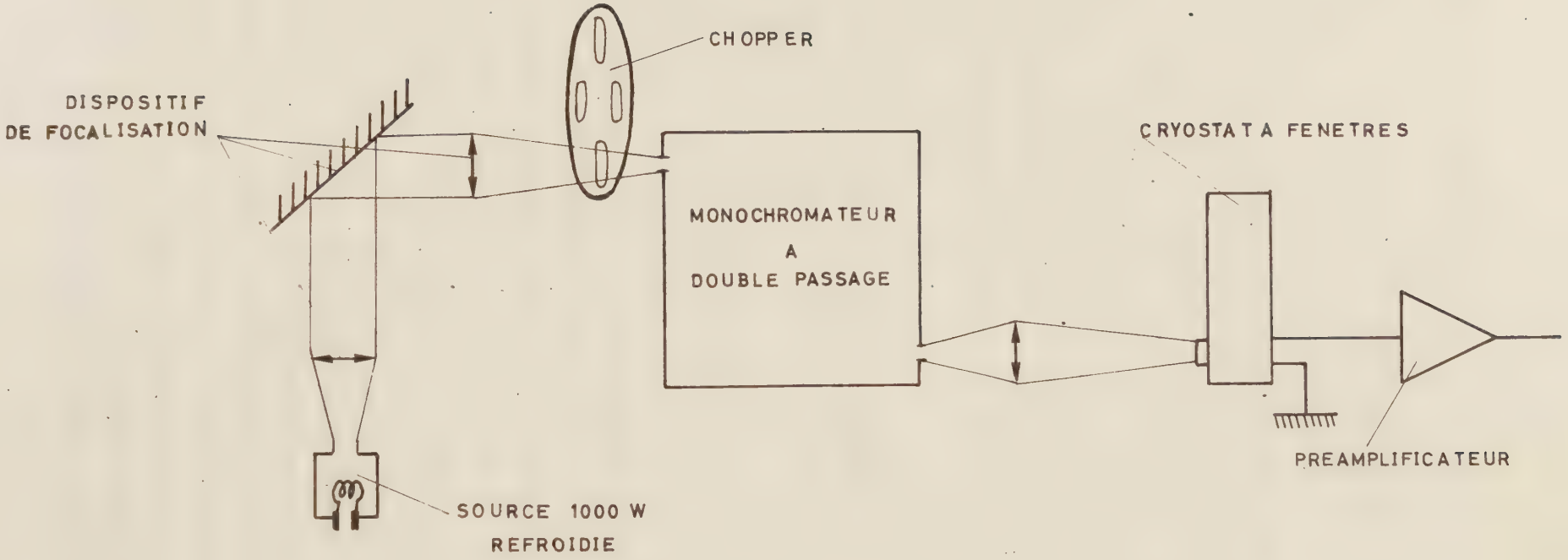
La détermination de la hauteur de barrière est effectuée par deux méthodes à 300°K et 77°K :

- capacité différentielle
- photoémission interne ou photoréponse.

D'une façon générale, il s'avère extrèmement délicat d'utiliser ces deux méthodes sur des contacts dont la résistance est inférieure à 10^4 Ω environ. Si la photoréponse peut néanmoins être utilisée, son interprétation en terme de hauteur de barrière devient douteuse comme nous le soulignons en annexe I. Ces mesures ont donc été effectuées sur des contacts clivés en ultravide réalisés sur des matériaux de dopage plus faible . Nos propres expériences aussi bien que celles qui ont été rapportées dans la littérature nous ont montré qu'à l'incertitude expérimentale près il n'est pas possible de mettre en évidence une dépendance de la hauteur de barrière avec le niveau de dopage dans les matériaux et le type de structure utilisés.

Le potentiel moyen d'une barrière M.S. est approximativement parabolique et il s'en suit que sa capacité varie en $(V - V_o)^{-1/2}$ où V est la polarisation et V_o le potentiel de diffusion, c'est-à-dire la courbure totale des bandes. Dans un matériau dégénéré

.../...



DISPOSITIF DE PHOTOREPONSE

Figure 4

et aux très basses températures V_o est relié à la hauteur de barrière V_b par la relation $V_b = V_o - \frac{3}{5} \mu_F$.
L'intersection de la droite $1/C^2 = f(V)$ avec l'axe des polarisations V donne donc immédiatement accès à la hauteur de barrière.
La méthode de photoréponse consiste à transférer des électrons du métal dans le semiconducteur en les excitant au-dessus de la barrière à l'aide d'une irradiation de l'interface à longueur d'onde variable. Le photocourant I, par photon reçu à des énergies supérieures de quelques kT à celle de la barrière, varie comme $(h\nu - V_b)^2$ où $h\nu$ est l'énergie des photons [7]. Le tracé de $I^{1/2} = f(h\nu)$ conduit à la hauteur de barrière. La hauteur de barrière ainsi mesurée n'est pas strictement la même que celle que l'on détermine par la méthode capacitive. Ceci tient essentiellement à l'influence de la force image que subissent les électrons pendant le transfert. Comme nous l'exposons en plus grand détail dans l'annexe I, cette technique possède une grande sensibilité et permet des comparaisons relatives fines entre plusieurs échantillons. Le dispositif expérimental utilisé (figure 4) est constitué d'une source de 1 000 Watts munie d'un choppeur mécanique entraîné par un moteur asynchrone synchronisé, d'un monochromateur à prismes à double passage, d'une optique de focalisation et d'un cryostat porte-échantillon à fenêtres optiques. La tension photoélectrique est recueillie aux bornes d'une résistance de charge qui peut être, dans certains cas, constituée par l'échantillon lui-même et le signal est traité par une détection synchrone. Ce signal doit être corrigé pour tenir compte du nombre de photons arrivant effectivement jusqu'à l'interface. L'illumination du semiconducteur peut être effectuée soit à travers le métal, soit à travers le semiconducteur. Dans le premier cas, l'épaisseur du métal ne doit pas dépasser 200 Å environ en raison de sa forte absorption. Les films métalliques minces ont une fâcheuse tendance à permettre une pollution et une mauvaise définition de

.../...

l'interface. C'est ce fait qui nous a poussés à choisir la seconde méthode en dépit d'un travail plus long d'extraction des résultats à partir des données expérimentales.

I - 3. Mesures électriques

Les mesures électriques d'effet tunnel consistent à tracer les courbes de dI/dV ou dV/dI et d^2I/dV^2 en fonction de la polarisation V à basse température. Le schéma complet du montage électronique est présenté sur la figure 5.

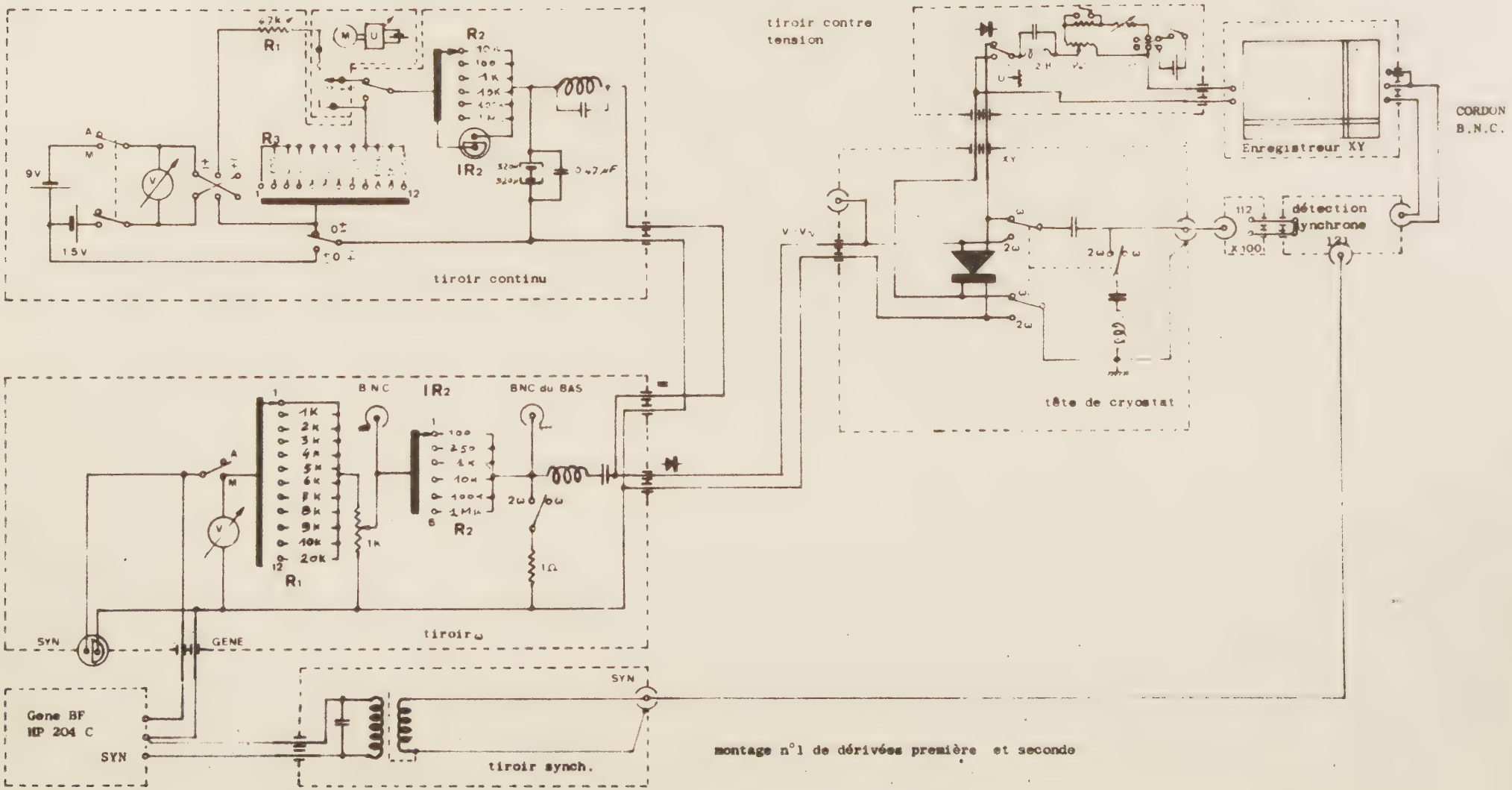
- Dérivée première

Par commodité, nous mesurons dV/dI, c'est-à-dire la résistance différentielle. Cette mesure est effectuée en superposant à la polarisation continue V une faible tension alternative $\Delta V(\omega)$ constante et en enregistrant le courant alternatif $\Delta I(\omega)$ en fonction de V. L'exploration $\Delta V(\omega)$ est maintenue inférieure à l'élargissement de la fonction de Fermi dû à la température finie :

$$\Delta V(\omega)_{efficace} \leq kT$$

Les phénomènes observés en dérivée première ne comportent donc pratiquement pas d'élargissement apporté par la technique de mesure. A 1°K ceci veut dire que $\Delta V(\omega)_{eff} \leq 85\ \mu V$. Le courant $\Delta I(\omega)$ est mesuré sur une résistance R_2 placée en série de l'échantillon ($R_S \sim R_2/1\ 000$) à l'aide d'un oscilloscope à entrée différentielle. $\Delta V(\omega)$ est mesuré aux bornes de l'échantillon au moyen d'un détecteur synchrone PAR 121 précédé d'un préamplificateur PAR 112 de gain 100 (100 MΩ d'impédance d'entrée). La fréquence adoptée est de 517 Hz. Deux circuits bouchons accordés à cette fréquence sont utilisés pour que le courant alternatif $\Delta I(\omega)$ ne soit dérivé ni vers le circuit de polarisation continue ni dans la branche de mesure de la tension

.../...



montage n°1 de dérivées première et seconde

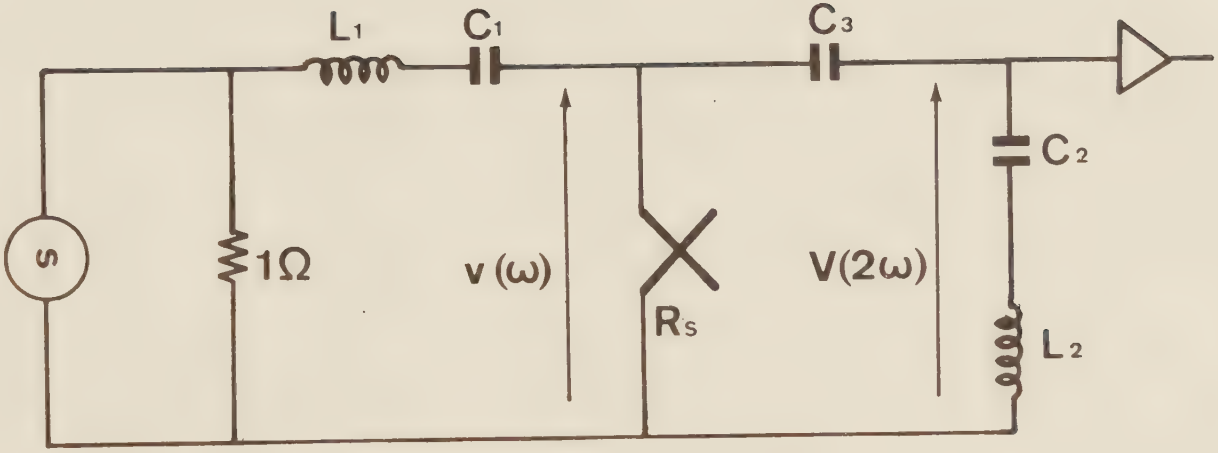


Figure 6

continue. De cette façon nous sommes assurés que, pour des impédances de jonction inférieures à 10^4 Ω environ, le courant $\Delta I(\omega)$ mesuré est bien égal au courant qui traverse le contact tunnel.

- Dérivée seconde

La dérivée seconde du courant par rapport à la tension est obtenue électroniquement par la détection de l'harmonique 2 du courant engendré par la non-linéarité des caractéristiques du contact M.S. :

$$I(2\omega) = d^2I/dV^2 \quad \frac{\cos 2\omega t}{4} \quad \Delta V^2(\omega)$$

La mesure de la dérivée seconde pose trois problèmes essentiels :
- Elimination de l'harmonique 2 engendré par le générateur B.F.
- Diminution du niveau du signal fondamental $\Delta V(\omega)$ pour ne pas saturer la détection synchrone.
- Adaptation d'impédance entre l'échantillon et le préamplificateur PAR 112 pour optimiser le rapport signal (2 ω) sur bruit.

La première condition est réalisée à l'aide d'un filtre accordé à 2 ω qui est placé en amont de la jonction et bloque le signal à 2 ω qui pourrait provenir du générateur B.F. Une résistance de 1 Ω sert à alimenter l'échantillon par une tension $\Delta V(\omega)$ sensiblement constante.
Le schéma de principe de la détection du deuxième harmonique [8] est représenté sur la figure 6. L'ensemble du circuit au-delà de la jonction est accordé à 2 ω alors que la branche de mesure de tension est accordée à ω. Ce circuit présente les avantages suivants :
- A 2 ω, la jonction tunnel ne "voit" que la résistance de la self. Si celle-ci est faible, l'on se trouve bien dans les conditions d'une mesure de courant.

.../...

- A 2 ω, l'ensemble du circuit présente une surtension, c'est-à-dire un gain appréciable et permet de plus une adaptation d'impédance entre l'échantillon et le préamplificateur.
- Le circuit atténue le fondamental $\Delta V(\omega)$ entre la jonction et le préamplificateur.

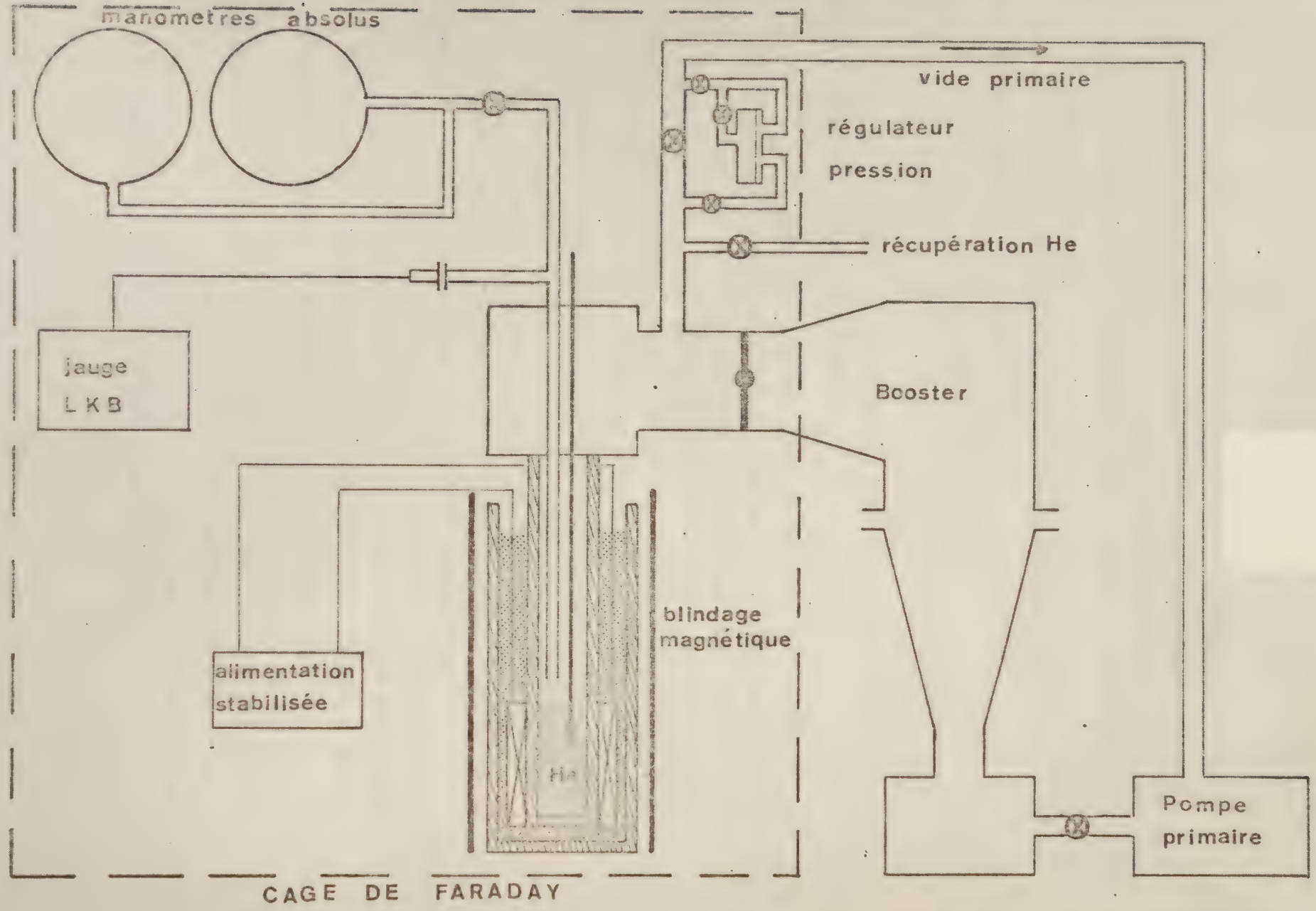
La tension $V(2\omega)$ qui est mesurée à l'entrée du préamplificateur est donnée par :

$$V(2\omega) = \frac{R_S d^2I/dV^2}{4(R_S + R_L)} \frac{3}{2} L\omega \Delta V^2(\omega)$$

où L, R_S et R_L sont respectivement la self, la résistance de l'échantillon et celle de la self.

Il est alors aisé, par la mesure de l'aire d'un pic de dérivée seconde, de remonter au calcul de la variation relative de conductance qui lui correspond. Les meilleures performances de ce montage sont obtenues pour des impédances de jonction tunnel allant de 10 à 50 Ω. Dans ces conditions, un test nous a confirmé que le bruit détecté correspond bien au bruit Johnson. Le bruit observé dans les contacts N.S. lui est toujours supérieur et nous sommes donc assurés de n'être limités que par le bruit propre du contact.
Dans les conditions de fonctionnement optimales, il est possible, avec un tel système, de mesurer des taux d'harmoniques $V(2\omega)/V(\omega) \sim 10^{-6}$ et nous avons pu mettre en évidence de façon reproductible des variations relatives de conductance de l'ordre de 10^{-4}. La nécessité de mesurer de très faibles tensions nous a conduits à prendre de grandes précautions pour limiter le bruit. L'ensemble du montage électronique et le cryostat sont installés à l'intérieur d'une cage de Faraday. Un blindage magnétique en tôle de μ-métal a été ajouté autour du circuit et du cryostat. Le générateur B.F. est alimenté par des batteries et toute boucle de masse a été éliminée du circuit.

.../...


manometres absolus
vide primaire
régulateur
pression
récupération He
jauge
LKB
Booster
blindage
magnétique
alimentation
stabilisée
He
Pompe
primaire
CAGE DE FARADAY

I - 3. Cryogénie

Les structures à étudier sont plongées directement dans l'hélium liquide contenu dans un cryostat métallique (figure 7). Une pompe primaire de 60m^3/heure et un Booster Edwards de 2 800 litres/s permettent d'abaisser la température du bain à 1,30°K et 0,9°K respectivement. Nous disposons de plus d'un solénoïde de cuivre placé dans le récipient à azote liquide qui permet d'appliquer aux jonctions un champ magnétique de 3 kGauss. Ce champ magnétique est suffisant pour faire transiter vers l'état normal les métaux supraconducteurs utilisés en tant que contre-électrodes.

II - ETUDE DU BACKGROUND

II - 1. Généralités

Nous entendons par "background" la conductance (ou la résistance) différentielle tracée en fonction de la polarisation V lorsque l'on néglige les petites irrégularités locales généralement observées et sur lesquelles nous reviendrons dans la partie consacrée aux interactions. Dans la plupart des cas ces "anomalies" ne représentent que quelques pourcent de la conductance totale. Ce n'est que depuis 1968 environ que les chercheurs ont tenté de façon sérieuse de comparer quantitativement les résultats théoriques et expérimentaux. Cet objectif a concordé de façon évidente avec le développement de la technique de réalisation des contacts par clivage et évaporation en ultra-vide qui produit des contacts d'une grande reproductibilité.

Les approches théoriques utilisées pour le calcul du background possèdent les points communs suivants :

- On considère un gaz de porteurs sans interactions.
- On néglige le caractère discret des charges portées par les impuretés ionisées qui forment la zone déserte c'est-à-dire la barrière de potentiel. En d'autres termes, l'influence des fluctuations de potentiel sur la structure de bandes et sur la forme de la barrière est négligée. Le potentiel utilisé est le potentiel moyen.
- L'interface entre le métal et le semiconducteur est supposé parfait et l'on néglige le désaccord cristallin existant entre les deux matériaux.
- Le système est alors invariant par translation dans le plan

.../...

parallèle au plan de la jonction. Le moment dans ce plan ($k_{//}$) est donc conservé à la réflexion comme à la transmission. Le problème à résoudre est unidimensionnel : effet tunnel spéculaire. On suppose que le moment des électrons $k_{//}$ est inférieur au moment de Fermi du métal quelle que soit l'orientation choisie.

- Dans ces approximations, la barrière de potentiel peut en principe être calculée exactement ainsi que le coefficient de transmission et la conductance associée. Un calcul sans paramètre ajustable implique que tous les paramètres des matériaux et du contact soient connus de façon indépendante.

Nous ne nous intéressons ici qu'à des semiconducteurs de type n. Convenons des définitions suivantes : ω représente l'énergie des électrons mesurée depuis le bas de la bande de conduction du semiconducteur ; V est la polarisation ; $V > 0$ (sens direct) correspond à l'injection d'électrons du semiconducteur vers le métal et inversement pour $V < 0$ (sens inverse) ; l'indice $_{//}$ décrit les quantités projetées dans un plan parallèle à celui de la jonction ; les indices R et L se rapportent aux matériaux de droite (semiconducteur) et de gauche (métal) respectivement.

Le courant tunnel peut s'écrire sous la forme [9] :

$$J = \frac{2eA}{h} \int d\omega \, [f_R(\omega) - f_L(\omega)] \int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} D\,(k_{//}, \omega, V)$$

Nous appelerons D le coefficient de transmission bien qu'il renferme aussi l'information sur la structure de bande des deux matériaux. La dépendance explicite en V du coefficient de transmission rend compte du fait que la barrière se déforme lorsqu'on la polarise. f est la fonction d'occupation des états électroniques.

.../...

Dans la pratique, le calcul exact du coefficient de transmission D est trop complexe et diverses approches approximatives ont été présentées que nous rappelons brièvement ici.

II - 2. Méthodes de calcul

Le calcul de D nécessite en principe de connaître non seulement la forme exacte de la barrière de potentiel mais aussi la relation de dispersion des électrons dans la bande interdite. Deux méthodes essentielles ont été mises en oeuvre dans un certain nombre de variantes : la résolution exacte pour un potentiel approché dite méthode CDMT et la résolution approchée par la méthode WKB.

- Méthode de Conley, Duke, Mahan et Tiemann [10] (CDMT)

Elle consiste à résoudre exactement l'équation de Schrödinger pour un potentiel idéal parabolique. Le potentiel moyen n'est en fait parabolique que si l'on néglige la présence de porteurs libres ainsi que la force image. Il l'est en effet à 0°K pour des énergies supérieures à la dégénérescence de Fermi μ_F du semiconducteur. Ce type de calcul n'a été employé, en raison de sa longueur, que dans l'approximation de la masse efficace (modèle à une bande). Cette dernière approximation n'est valable que si, aux énergies considérées, on peut négliger l'influence de la bande de valence. Typiquement, elle est justifiée si $V_b/E_g \ll 1/2$ où E_g est la largeur de la bande interdite. Ce calcul présente l'inconvénient de ne pas faire ressortir de façon claire la signification physique des différents facteurs. On peut cependant imaginer d'utiliser cette méthode dans le cas général au prix d'un grand nombre d'heures d'ordinateur.

- Méthode WKB

Si cette méthode semi-classique de résolution de l'équation de Schrödinger n'est qu'approchée, elle présente à notre sens l'énorme avantage de pouvoir s'appliquer à un très grand nombre de situations expérimentales. Les formes du potentiel et de la relation de dispersion dans la bande interdite peuvent être variées sans inconvénient majeur et la durée des calculs est très nettement plus faible que dans la méthode précédente. Il faut souligner cependant que cette approximation n'est strictement valable que si les énergies ω considérées sont éloignées d'au moins quelques millivolts des bords de bandes. Enfin, cette méthode escamote le problème du raccordement des fonctions d'ondes à l'interface. Padovani et Stratton [11] néanmoins ont calculé que pour des énergies ω comprises entre 10 meV et 300 meV typiquement, le rapport des coefficients de transmission D_{JDMT}/D_{WKB} pour un potentiel test était pratiquement constant et de l'ordre de 2 ou 3, c'est-à-dire sans influence majeure sur la conductance différentielle.
Padovani et Stratton ont utilisé cette méthode dans le but d'obtenir des formules analytiques à hautes polarisations $|V| \gtrsim 300$ mV. Ce domaine ne nous concerne pas ici dans la mesure où tous les phénomènes d'effet tunnel intéressants se produisent généralement pour $0 < |V| \lesssim 50$ mV. Conley et Mahan [2] l'ont appliqué aux faibles polarisations mais en introduisant un facteur $\omega^{1/2}$ de façon arbitraire et sans effectuer la quadrature sur les $k_{//}$.

Nous avons repris la méthode WKB en éliminant le préfacteur $\omega^{1/2}$ et en effectuant la quadrature sur $k_{//}$. Nous utilisons le modèle de Franz [3] à deux bandes et tenons compte de l'anisotropie éventuelle de la bande de conduction (n-Ge et n-GaSb). Notre méthode de calcul présente l'avantage indéniable d'être beaucoup plus rapide que les autres et, comme nous le verrons, de fournir cependant des résultats très voisins sinon équivalents.

.../...

II - 3. Caractéristiques générales de la résistance différentielle

La conductance différentielle comprend deux termes. Le premier est dû au fait que lorsque l'on applique un incrément δV de polarisation, une quantité supplémentaire d'électrons se trouvent disponibles pour faire tunnel, ce qui provoque un incrément de courant. Le deuxième terme correspond au fait qu'une modification de polarisation entraîne une déformation de la barrière et par là une variation du coefficient de transmission pour les électrons qui contribuaient déjà à l'effet tunnel. Si ce terme est négligeable la plupart du temps dans les barrières hautes et étroites du type Métal-Isolant-Métal (M.I.M.), il s'avère que dans les structures M.S., il devient essentiel dès que la polarisation dépasse 100 meV environ.
Quel que soit le modèle de calcul utilisé, le coefficient de transmission D comporte un facteur exponentiel :

$$D(k_{//}\ ,\ \omega,\ V) = A \exp -2 \int_{x_1}^{x_2} k(x)\, dx$$

où x_1 et x_2 sont les abscisses des points tournants et k(x) le "moment" de l'électron dans la barrière isolante. Dans le modèle WKB, A ≡1 et dans le modèle CDMT, A est de l'ordre de 1 mais dépend de l'énergie et du moment. Dans aucun modèle, il n'apparait de façon claire la densité d'états des électrodes et ce point a longtemps été le sujet d'une controverse. Nous verrons que la théorie "exacte" [5] présentée dans la quatrième partie apporte une réponse formelle et une interprétation physique nette.
La forme générale de la résistance différentielle peut être discutée à partir du terme exponentiel. A haute polarisation positive et négative, le terme prépondérant est celui qui provient de la déformation de la barrière. Les électrons qui contribuent le plus à l'effet tunnel sont ceux qui se trouvent au voisinage du niveau de Fermi de l'injecteur. Le coefficient de transmission correspondant diminue avec la polarisation en direct ainsi qu'en inverse et il en résulte que la résistance différentielle décroît exponentiellement au-delà de ± 100 meV environ. La position du

.../...

maximum de résistance V_{max} peut être discutée qualitativement à partir de deux rapports : μ_F/E_o et V_b/E_g où

$$E_o = (e^2 N\hbar^2/4m^*\varepsilon_s)^{1/2}$$

N est la concentration d'impuretés donnatrices et E_o est un paramètre du matériau qui exprime approximativement le domaine d'énergie (au voisinage du niveau de Fermi de l'injecteur) des électrons qui contribuent pour l'essentiel de la conductance tunnel.
Si $\mu_F \gg E_o$, les électrons qui participent à l'effet tunnel ne "voient" pas le bord de la bande de conduction et la position du maximum dépend de V_b/E_g sans pouvoir être prédite de façon simple. C'est le cas du n-GaAs et du n-GaSb au dessous de 5 kbars. Si $\mu_F < E_o$, les électrons "voient" le bas de bande et V_{max} est très voisin de μ_F c'est-à-dire à une polarisation directe telle que le niveau de Fermi du métal passe au niveau du bas de la bande de conduction du semiconducteur. A une polarisation supérieure, l'expression de la conductance se réduit au seul terme de déformation de barrière. C'est le cas du n-Ge et du n-GaSb à des pressions supérieures à 7 kbars environ.

II - 4.Résultats expérimentaux

Comme nous l'avons mentionné plus haut, nous ne rapportons que des résultats obtenus par la méthode du clivage et évaporation en ultra-vide. Trois matériaux ont été particulièrement étudiés dans ce travail : n-Ge (gap indirect) ; n-GaAs (gap direct) ; n-GaSb (gap direct ou indirect suivant la pression). Si des résultats concernant le p-GaAs, n et p-Si et n-CdS ont été rapportés dans la littérature, aucun de ces matériaux n'a subi d'étude quelque peu systématique. Nous ne rappellerons que les résultats obtenus sur le n-Ge à basse polarisation ($|V| \lesssim 200$ mV) par Davis et Steinrisser [12].

Dans la mesure du possible nous présenterons les résultats sous forme de tableaux et de figures,

.../...

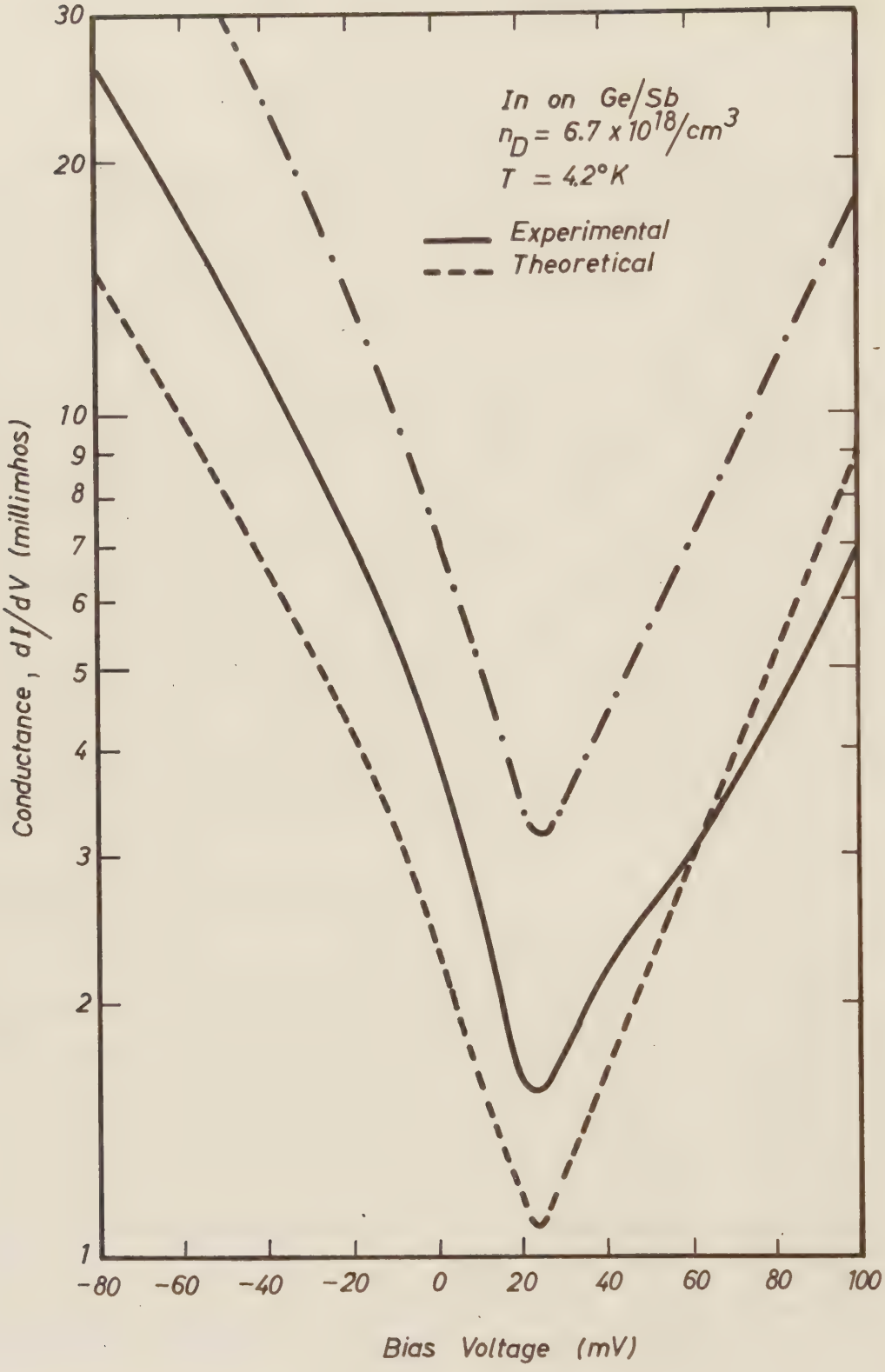

In on Ge/Sb
$n_D = 6.7 \times 10^{18}/cm^3$
T = 4.2°K
Experimental
Theoretical
Conductance, dI/dV (millimhos)
30
20
10
9
8
7
6
5
4
3
2
1
-80
-60
-40
-20
0
20
40
60
80
100
Bias Voltage (mV)

Figure 8

et les conclusions seront commentées. Convenons dès à présent d'appeler G la conductance différentielle à V = 0 observée expérimentalement et G_{sp} la conductance "spéculaire" calculée dans le modèle du potentiel moyen. Les calculs sont toujours effectués sans paramètre ajustable.

- n-Germanium

La bande de conduction de ce matériau est constituée de vallées ellipsoïdales L_1 situées en bord de zone de Brillouin et placées dans la direction [111] et les directions équivalentes. La vallée centrale isotrope Γ est, à pression ordinaire, située à environ 150 meV au-dessus des vallées L_1. Davis et Steinrisser ont clivé le Germanium dans des plans (100). Dans la direction du courant tunnel (100), les quatre vallées L_1 sont équivalentes. Le n-Ge représente un cas de semiconducteur à gap indirect et à faible dégénérescence ($E_o \gg \mu_F$). La position du maximum de la résistance V_{max} devrait donc se placer au voisinage de μ_F.
Les résultats de Davis et Steinrisser [12] sont résumés dans le tableau I.

n (cm^{-3})	Dopant	G_{sp} (Ω^{-1})	G (Ω^{-1})	μ_F (meV)	V (mV)
6.7×10^{18}	Sb	2.2×10^{-3}	3.8×10^{-3}	23	22
5.1×10^{18}	As	1.3×10^{-4}	10^{-3}	19	20

Tableau I

La figure 8 montre que la forme générale et la position du maximum sont en bon accord avec le calcul CDMT utilisé par ces auteurs. Lorsque les mesures de caractérisation du

.../...

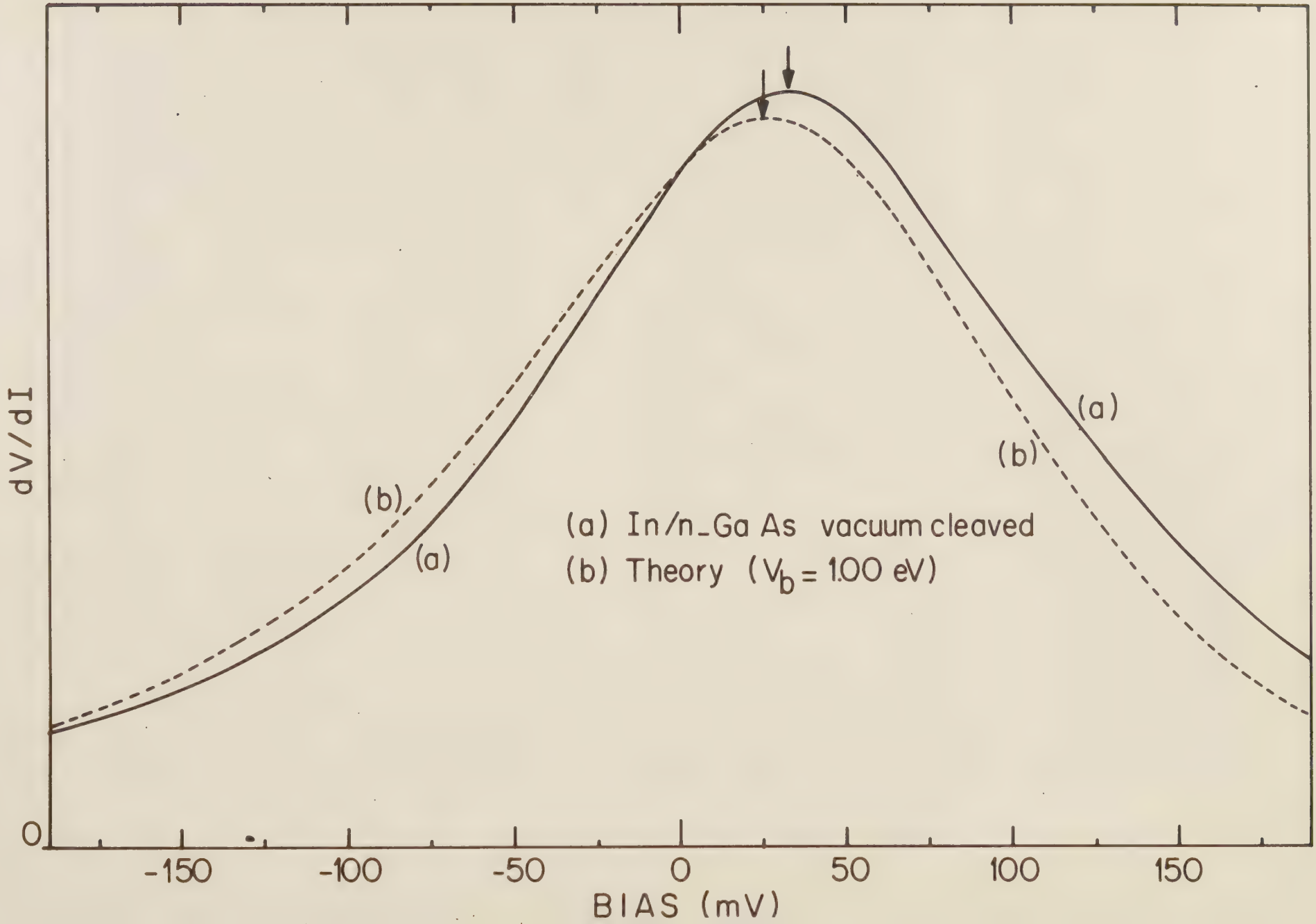
contact sont menées avec soin, l'on peut s'attendre à ce que l'incertitude sur la valeur des paramètres choisis n'entraîne qu'une erreur sur la conductance calculée qui peut être estimée à ± 30 %, soit un facteur 2 entre les valeurs extrêmes. La dispersion expérimentale obtenue par ces auteurs correspond à ce facteur 2 et l'on peut donc considérer que les conditions optimales de reproductibilité sont atteintes.

Les jonctions dopées à l'antimoine ont constitué le premier réel succès d'effet tunnel spéculaire quantitatif. Il est clair à la lumière de ce qui précède, que pour le matériau dopé à l'arsenic, l'écart d'un facteur 10 observé ne peut être attribué à l'incertitude des paramètres. Comme les auteurs le suggèrent eux-mêmes, cet écart anormal peut être dû à l'influence des fluctuations de potentiel engendrées par la présence des ions As^+. Signalons enfin que notre calcul WKB prédit lui aussi une forme correcte et une amplitude voisine de la conductance différentielle comme le montre la figure 8 (courbe supérieure).

- n-GaAs

Nous avons particulièrement étudié le cas très différent que constitue ce matériau à gap direct et à forte dégénérescence ($E_o \ll \mu_F$). Ce dernier point entraîne que les électrons voisins du bord de bande ne contribuent pas à l'effet tunnel et justifie l'emploi de la méthode WKB . Comme nous l'avons annoncé plus haut, la position du maximum de résistance dépend de V_b/E_g car $E_o \ll \mu_F$. Si un seul type de dopant (tellure) a été employé, par contre, deux niveaux de dopage ont été choisis et la hauteur de la barrière a été modifiée systématiquement en changeant la nature de la contre-électrode. Quatre métaux différents ont été utilisés dans le but de couvrir la gamme maximale de hauteur de barrière. L'essentiel des résultats théoriques et expérimentaux est présenté en Annexe I et nous n'aborderons ici que les grandes lignes de cette étude.

.../...


dV/dI
0
-150
-100
-50
0
50
100
150
BIAS (mV)
(a)
(b)
(b)
(a)
(a) In/n-Ga As vacuum cleaved
(b) Theory (V_b = 1.00 eV)

Nous avons porté notre attention sur les quantités suivantes : valeur numérique de la résistance à V = 0 ; position du maximum de résistance différentielle V_{max} ; "courbure" définie par $|dR_N(V)/dV|$ où $R_N(V) = R(V)/R(0)$. Les calculs ont été effectués à l'aide d'un potentiel parabolique dont la forme analytique simple permet de ramener à 50 secondes (IBM 360/40) la durée nécessaire à l'obtention d'une courbe de résistance différentielle entre - 200 et + 200 mV. Les métaux utilisés sont l'étain, le plomb, l'indium et l'or dont les hauteurs de barrière à 77°K sont respectivement $0,83_5$, 0,91, $0,99_5$ et 1,02 eV et les concentrations d'impuretés (tellure) sont 5.4 et $3 \times 10^{18} cm^{-3}$. Dans chaque cas étudié, la reproductibilité est optimale, c'est-à-dire que les valeurs extrêmes de la résistance à V = 0 d'un groupe de contacts analogues ne sont séparées que par un facteur inférieur ou égal à 2.

D'une façon générale, l'accord quantitatif sur la valeur de la résistance est très satisfaisant dans la mesure où la résistance calculée est au maximum 2 fois supérieure à la résistance observée. Ceci, il faut le rappeler, ne correspond qu'à une erreur de 5 % sur l'argument de l'exponentiel du coefficient de transmission. Ceci peut donc être considéré comme un accord quantitatif remarquable, d'autant plus qu'il est obtenu sur des valeurs recouvrant trois décades.

La forme générale de la résistance différentielle est, elle aussi, prédite de façon satisfaisante par le calcul en ce sens que la position V_{max} et la courbure sont assez bien respectée (fig.9). Le point important que nous avons mis en évidence est l'indépendance respective de l'influence de la hauteur de barrière et de celle de la concentration d'impuretés sur la forme de la résistance différentielle.

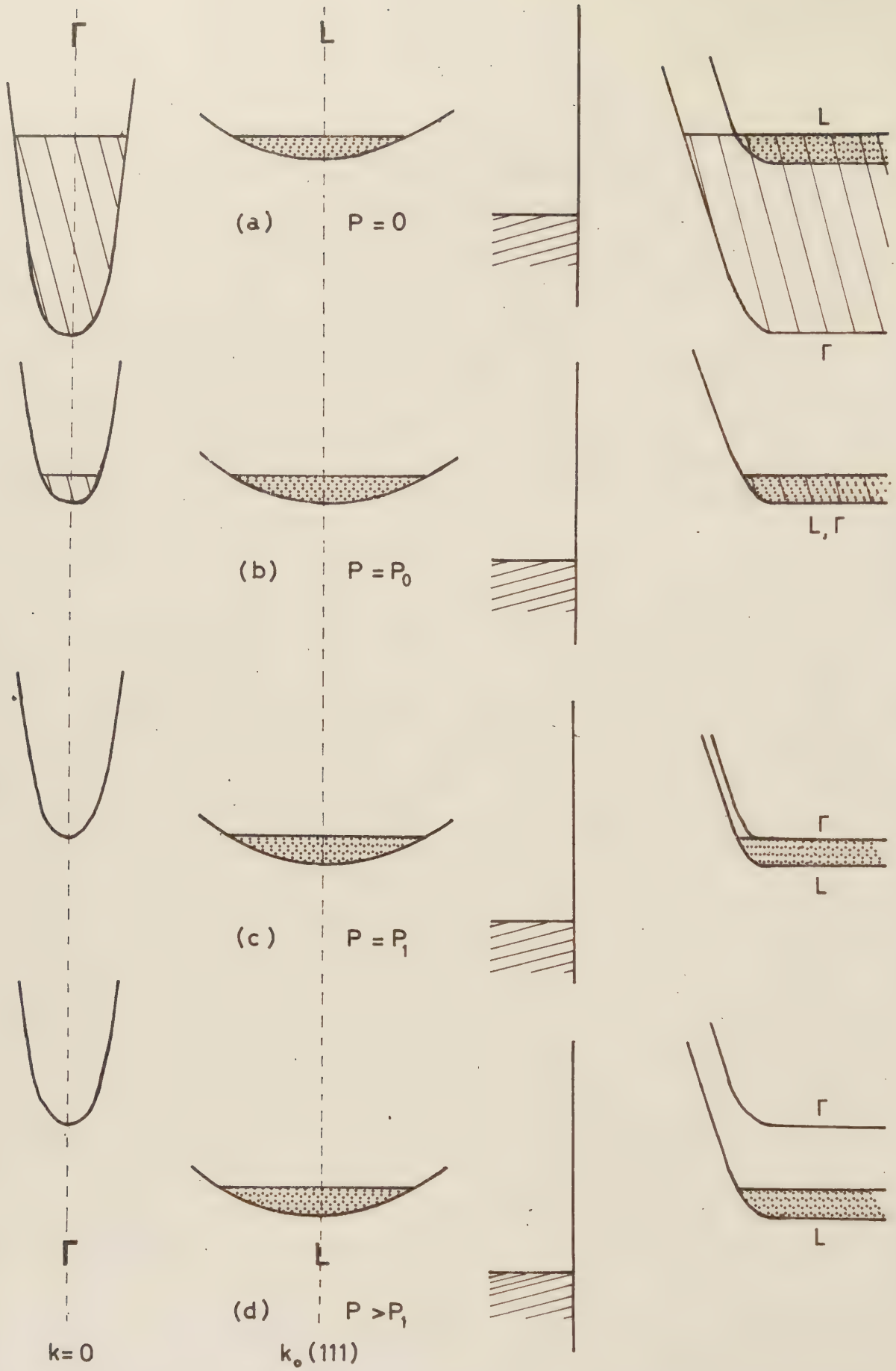
Ceci n'est vrai, soulignons le, que pour des matériaux analogues au n-GaAs, c'est-à-dire tels que $E_o \ll \mu_F$ et $V_b/E_g > 1/2$. Dans la gamme d'utilisation usuelle de hauteur de barrière et de niveau de dopage, il est donc possible de déterminer ces deux quantités par effet tunnel.

Lorsque la barrière devient plus haute, V_{max} se déplace vers les tensions positives élevées. La sensibilité de cet effet peut s'exprimer par $\Delta V_{max}/\Delta V_b \sim 0.1$. La courbure, elle, augmente lorsque le dopage diminue sans modifier de façon sensible la position du maximum de résistance.
La reproductibilité de nos mesures nous a permis cependant de mettre en évidence un désaccord systématique léger entre théorie et expérience en ce qui concerne les valeurs absolues de V_{max} et de la courbure. Ce sont donc les variations de forme et d'amplitude de la résistance différentielle qui sont le mieux représentées par le calcul.

En conclusion, il apparaît que la méthode WKB utilisée pour un potentiel moyen parabolique conduit à une interprétation quantitative satisfaisante des résultats expérimentaux. Les désaccords systématiques légers observés peuvent être attribués à différentes causes. L'utilisation de l'approximation WKB et l'omission de la force image peuvent difficilement être invoquées pour expliquer le désaccord de forme. Nous reviendrons plus loin sur les fluctuations de potentiel dont l'effet peut, dans certaines conditions, devenir important. Contrairement aux matériaux à faible dégénéreseence et faible hauteur de barrière, les corps tels que le n-GaAs présentent une résistance tunnel dont l'allure dépend de façon sensible de la forme du potentiel de barrière. Le calcul WKB a été appliqué au cas d'un potentiel "parabolique exponentiel" qui constitue une excellente approximation du potentiel moyen exact tenant compte de la présence de porteurs libres. Les résultats de ce calcul montrent en fait des désaccords systématiques équivalents mais de signe opposé. Tout se passe comme si le potentiel moyen "effectif" était intermédiaire entre le potentiel exact et le modèle parabolique approché.

En résumé, nous avons montré dans le n-GaAs que le calcul WKB est en accord quantitatif avec l'expérience et qu'il prévoit de façon satisfaisante la forme de la conductance diffé-

.../...



STRUCTURE DE BANDE DU n-GaSb ET CONTACT M.S.

SOUS PRESSION

Figure 10

rentielle dans toute la gamme de réalisation pratique des contacts M.S.. Ce type de matériau ($V_b > E_g/2$ et $\mu_F \gg E_o$) se prête à la détermination par effet tunnel de la concentration d'impuretés ionisées et de la hauteur de barrière.

- n-GaSb

Le GaSb représente un cas intermédiaire intéressant entre le germanium et l'arséniure de gallium. En effet, ce matériau possède un gap direct à pression nulle et sous une pression hydrostatique supérieure à ~ 10 kbars dite pression d'inversion (P_o), son gap devient indirect (Fig. 10). Nos expériences nous ont ainsi permis d'étudier, sur un matériau unique, les relations qui existent entre effet tunnel et structure de bandes. La bande de conduction de GaSb comprend une vallée centrale ($k \sim 0$) isotrope de masse efficace $m_\Gamma = 5.10^{-2}\ m_o$ et huit vallées L en forme de demiellipsoïdes de révolution autour de l'axe [111] et les axes équivalents. Le centre de ces ellipsoïdes est situé en bord de zone de Brillouin ($k_o \sim 8.9 \times 10^7\ cm^{-1}$). La différence d'énergie entre les vallées L et Γ, $\Delta E(P)$, dépend de la pression P. Les déterminations expérimentales rapportées dans la littérature sont toutes indirectes et proposent les valeurs suivantes :

$$80 \leqslant \Delta E(o) \leqslant 96\ meV$$

Nous avons mesuré de façon directe, par effet tunnel [13], cette séparation pour des dopages de 3.5 et $3.8 \times 10^{18}\ cm^{-3}$. Nos résultats sont les suivants :

$$\Delta E(P) \equiv E_L(P) - E_\Gamma(P) = \Delta E(o) - 9.6\ meV/kbar$$

où $\Delta E(o) = (100 \pm 5)\ meV$.

Nous avons mesuré, d'autre part, les variations avec la pression de la hauteur de barrière par la méthode capacitive à 300°K . Les autres paramètres du matériau ne subissent que des variations

.../...

négligeables à part le gap dont les modifications ont été rapportées dans la littérature. Nous avons adopté les valeurs moyennes $m_t = 0.1\ m_o$ et $m_l = 0.9\ m_o$. La dégénérescence de Fermi dans chaque type de vallée est calculée à l'aide des paramètres mentionnés plus haut. Les calculs sont donc effectués de nouveau sans paramètre ajustable et en tenant compte de la forme et de l'orientation des ellipsoïdes. Le GaSb est de toute évidence un matériau encore loin d'être connu aussi complètement que le Ge et le GaAs et l'on peut s'attendre à ce que la plus grande incertitude sur les paramètres rapportés par la littérature entraîne un moins bon accord entre théorie et expérience. Dans ces conditions, il est évident que la méthode de calcul la plus simple est recommandée, c'est-à-dire la méthode WKB.

Le tableau II présente les résultats (V = 0) à la pression ambiante pour deux matériaux de dopages différents clivés suivant un plan (110).

Diode	n (cm^{-3})	Dopant	G_{sp} (Ω^{-1})	G (Ω^{-1})	Métal	Remarque
CGSP 5	1.28×10^{18}	Te	1.67×10^{-3}	1.5×10^{-3}	Pb	$\mu_F^{(\Gamma)} < \Delta E$
CGSP 8	3.35×10^{18}	Te	1.43	7.15×10^{-1}	Pb	$\mu_F^{(\Gamma)} > \Delta E$

Tableau II

A pression ambiante ces deux matériaux correspondent au cas $\mu_F^{(\Gamma)} \gg E_o$. Les caractéristiques de ces matériaux sont semblables à celles du GaAs et en conséquence la forme de la résistance différentielle est du même type. Dand l'échantillon CGSP 8, les vallées supérieures L ont une influence indirecte. La contribution directe des vallées L est tout à fait négligeable et la seule influence de ces vallées tient au fait que leur densité d'états est très grande. La position du niveau de Fermi dans la

.../...

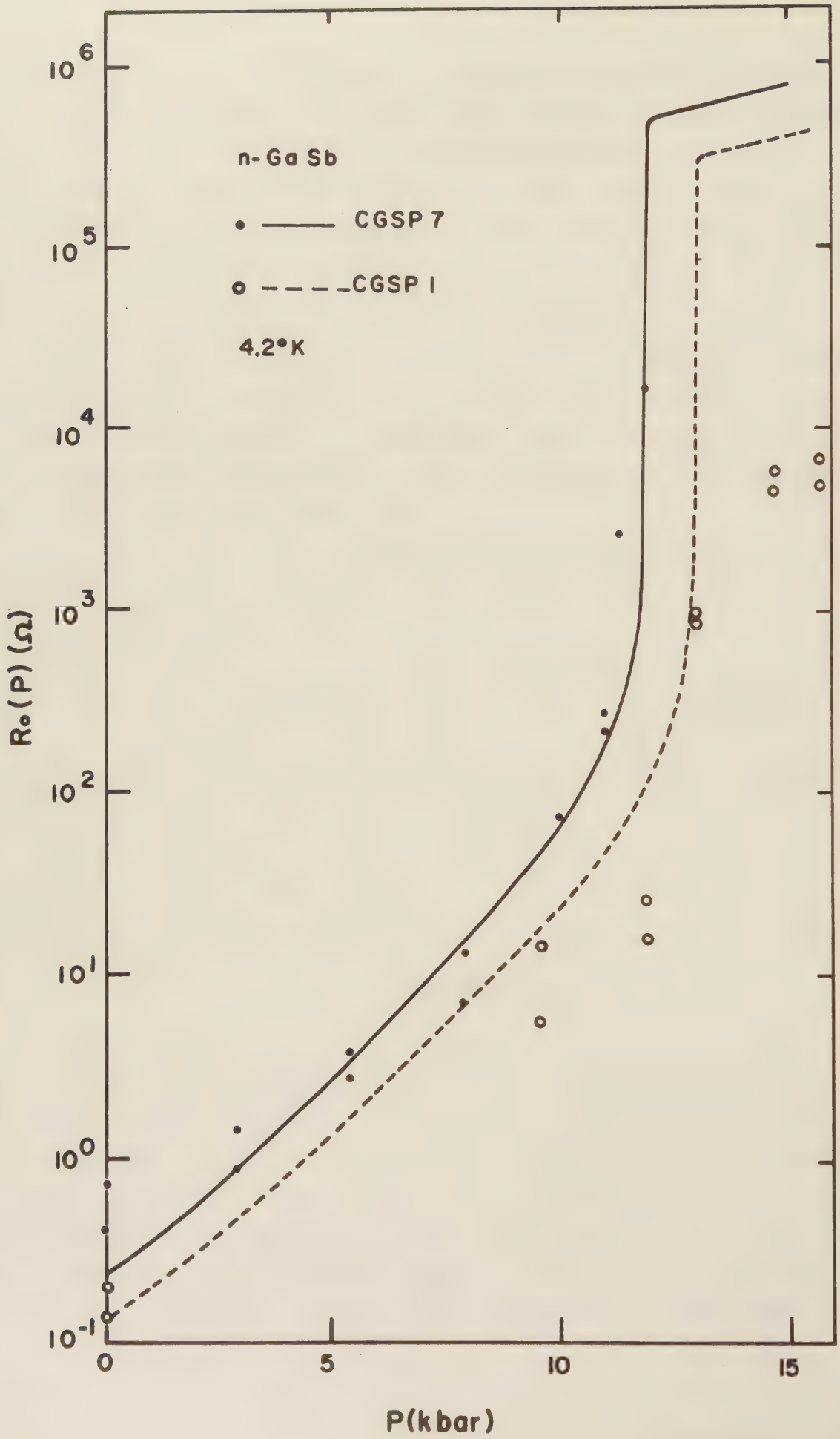

n-Ga Sb
CGSP 7
CGSP 1
4.2°K
10^6
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
10^0
10^{-1}
$R_o(P)$ (Ω)
0
5
10
15
P(kbar)

Figure 11

vallée Γ est essentiellement déterminée par les propriétés des vallées L et la séparation ΔE. De même que pour le GaAs, le calcul prédit une forme de résistance différentielle très convenable.

Lorsqu'on applique une pression hydrostatique, la résistance à V = 0 augmente et subit une variation très rapide au voisinage d'une certaine pression P_1. Cette pression P_1 correspond a la configuration des bandes présentée sur la figure 10 : le niveau de Fermi du semiconducteur coïncide avec l'énergie du minimum de la vallée Γ. Au delà de P_1, la conductance en direct n'est due qu'aux vallées L de masse lourde. Le changement de masse effective autour de $P \sim P_1$ entraîne un brusque saut de la résistance à V = 0. Ceci est illustré par la figure 11 sur laquelle sont représentées les variations de R(o) avec P pour deux matériaux de dopages légérement différents. La pression P_1 semble dépendre légèrement de la concentration d'impuretés. Les courbes sont calculées et les points correspondent aux valeurs expérimentales mesurées. L'accord obtenu est tout à fait satisfaisant jusqu'aux pressions voisines de P_1. Au delà de cette pression (JGSP 1), il est clair que la conductance observée est environ 75 fois plus grande que la conductance calculée. Il apparaît hors de question que la raison de cet écart puisse être attribuée à une erreur sur les paramètres de la barrière et des vallées L. L'argument suivant lequel k_o serait supérieur au moment de Fermi du métal ne peut être invoqué car il résulterait en une conductance spéculaire inférieure a la conductance calculée. Cette anomalie sera étudiée dans la quatrième partie.

En résumé, la forme et la valeur de la résistance différentielle sont correctement prédites par le calcul lorsque $P < P_1$, c'est-à-dire lorsque la vallée Γ fournit la contribution principale du courant . A $P > P_1$, il est clair qu'un mécanisme tunnel nouveau apparaît et l'emporte sur le chemin spéculaire habituellement considéré.

.../...

II - 5. Conclusions

Cette étude quantitative approfondie dans des conditions expérimentales et théoriques variées permet de faire le point et de dresser un certain nombre de conclusions.

Les théories habituelles, comme nous l'avons souligné, négligent les phénomènes de fluctuation de potentiel et se consacrent principalement à l'étude du potentiel moyen produit par le contact et l'assemblée des impuretés ionisées présentes dans le semiconducteur. Négliger les fluctuations de potentiel revient à introduire les approximations suivantes :

- La bande de conduction du matériau dégénéré est assimilée à celle du matériau pur : la modification de la densité d'états due aux impuretés et, en particulier, les queues de bandes sont négligées.

- La diffusion des électrons par ces mêmes impuretés et le libre parcours moyen associé sont négligés : l'effet tunnel non spéculaire est donc écarté.

Le problème essentiel qui demeure est alors uniquement celui du choix du modèle de calcul. Il s'agit d'adopter le potentiel moyen le plus réaliste et la méthode calcul la plus exacte possible. Il est clair qu'en principe au moins le calcul de la conductance due au potentiel moyen est réalisable, au prix, bien sûr d'un temps d'ordinateur important. Il s'agit donc ici d'une question de moyens plutôt que d'un problème fondamental. Dans de nombreuses situations dont le GaAs représente un exemple concluant, il apparaît clairement qu'un modèle de barrière et de calcul approché permet de rendre compte quantitativement de la plupart des aspects de la conductance tunnel d'un contact M.S. propre et convenablement caractérisé. Il existe cependant des situations particulières où les écarts très importants observés semblent très difficilement attribuables à l'incertitude existant sur la valeur des paramètres et aux approximations utilisées dans le calcul du courant spéculaire. Si le GaSb à haute pression ($P > P_1$) repré-

.../...

sente l'exemple le plus clair que nous ayons mis en évidence, il est encore beaucoup plus aisé de s'en convaincre en se rapportant aux résultats les plus anciens concernant les diodes p-n tunnel réaliséessur des semiconducteurs à gap indirect. Nous résumons les résultats de R.N. Hall [14] obtenus sur du Ge et qui demeurent à ce jour non interprétés formellement et quantitativement. En raison du désaccord de moment entre le coté n et le coté p du germanium, il ne peut en principe exister aucun courant spéculaire tant que la polarisation n'atteint pas le seuil permettant l'injection directe dans la vallée Γ (Kane Kink) . On observe en réalité un courant non nul dès $V = 0$ et des augmentations brusques de conductance aux polarisations qui correspondent à l'énergie des phonons de bord de zone de Brillouin. Ce dernier phénomène correspond à la possibilité donnée à un électron d'émettre des phonons de bord de zone dont le moment permet le transfert des électrons des vallées L vers la bande de valence. Le courant qui existe à plus faible polarisation dépend de la nature des impuretés et a été interprété qualitativement comme résultant d'un processus analogue induit non pas par les phonons mais par la diffusion des électrons par les impuretés ionisées avec transfert de moment de l'ordre de k_o. Dans cette situation, le courant est donc entièrement dû à la présence de fluctuations de potentiel. L'influence de ces fluctuations nous semble constituer le point fondamental essentiel qui demeure irrésolu dans le traitement du courant tunnel d'un contact métal-semiconducteur et nous l'aborderons de façon systématique dans la 4ème partie.

III - INTERACTIONS

III - 1. Généralités

La présence d'anomalies locales de conductance différentielle a été détectée de longue date et attribuée au fait que les électrons qui participent à l'effet tunnel interagissent avec leur environnement : phonons, électrons, impuretés magnétiques etc...

L'étude fine de la densité d'états d'un supraconducteur par l'effet tunnel a certainement consitué l'un des plus riches chapitres de l'utilisation de cette technique. La présence de structures irrégulières dans la conductance a incité les chercheurs à raffiner leurs moyens spectroscopiques et à développer les techniques de dérivées secondes.

Bien que les diodes p-n et les structures métal-isolant-semiconducteur (M.I.S.) présentent un certain nombre de structures que l'on peut attribuer aux interactions des électrons, nous nous limiterons néanmoins aux contacts M.S. dans lesquels la spectroscopie est analogue. Seuls les matériaux de type n retiendront notre attention. Nous excluons volontairement les structures souvent observées autour de la polarisation nulle et en particulier les effets qui sont attribués à l'interaction des électrons avec des impuretés magnétiques. Les matériaux que nous avons utilisés ne présentent pas d'anomalies de ce type lorsque les contacts sont réalisés par clivage et évaporation sous ultravide. Ces matériaux (n-Ge, n-GaAs, n-GaSb) présentent l'essentiel des phénomènes d'interaction qui ont pu être mis en évidence dans les barrières de Schottky.

Nous présentons ces effets dans la séquence suivante :

- Phonons du métal normal
- Phonons de bord de zone de Brillouin dans les semiconducteurs à gap indirect
- Phonons optiques du semiconducteur.

Nous ne parlerons pas ici des structures attribuées à l'émission de plasmons en raison de leur faiblesse et de leur grande extension en énergie, caractères qui, bien évidemment, rendent pratiquement impossible leur identification précise.

D'une façon générale, les approches théoriques utilisées pour l'interprétation, voire le calcul, de tous ces effets sont variées et pèchent souvent par manque de rigueur. Nous reprendrons, formellement au moins, leur traitement de façon rigoureuse dans la 4ème partie.

III - 2. Phonons du métal normal

Nous avons mis en évidence des structures correspondant à la densité d'états des phonons de l'électrode métallique à l'état normal dans les contact Pb/n-GaAs et Sn/n-GaAs. Au, Al, et Pd ne présentent pas d'effet mesurable. Ces observations correspondent de très près à celles qui ont été effectuées dans les structures M.I.M.. La figure 12 montre les structures observées à l'état normal (courbe a) et à l'état supraconducteur (courbe b). La courbe b a été déplacée du demi-gap Δ du plomb supraconducteur vers l'origine des polarisations. La forme de ces structures est la même mais les variations relatives de conductance sont substantiellement plus faibles dans les M.S. et dépendent des conditions de préparation des contacts. Ces structures sont essentiellement paires en conductance et correspondent à des augmentations de conductance. La dérivée seconde est donc impaire comme le montre la figure 12. Le tableau III présente les valeurs de variations relatives de conductance obtenues par différentes méthodes.

.../...

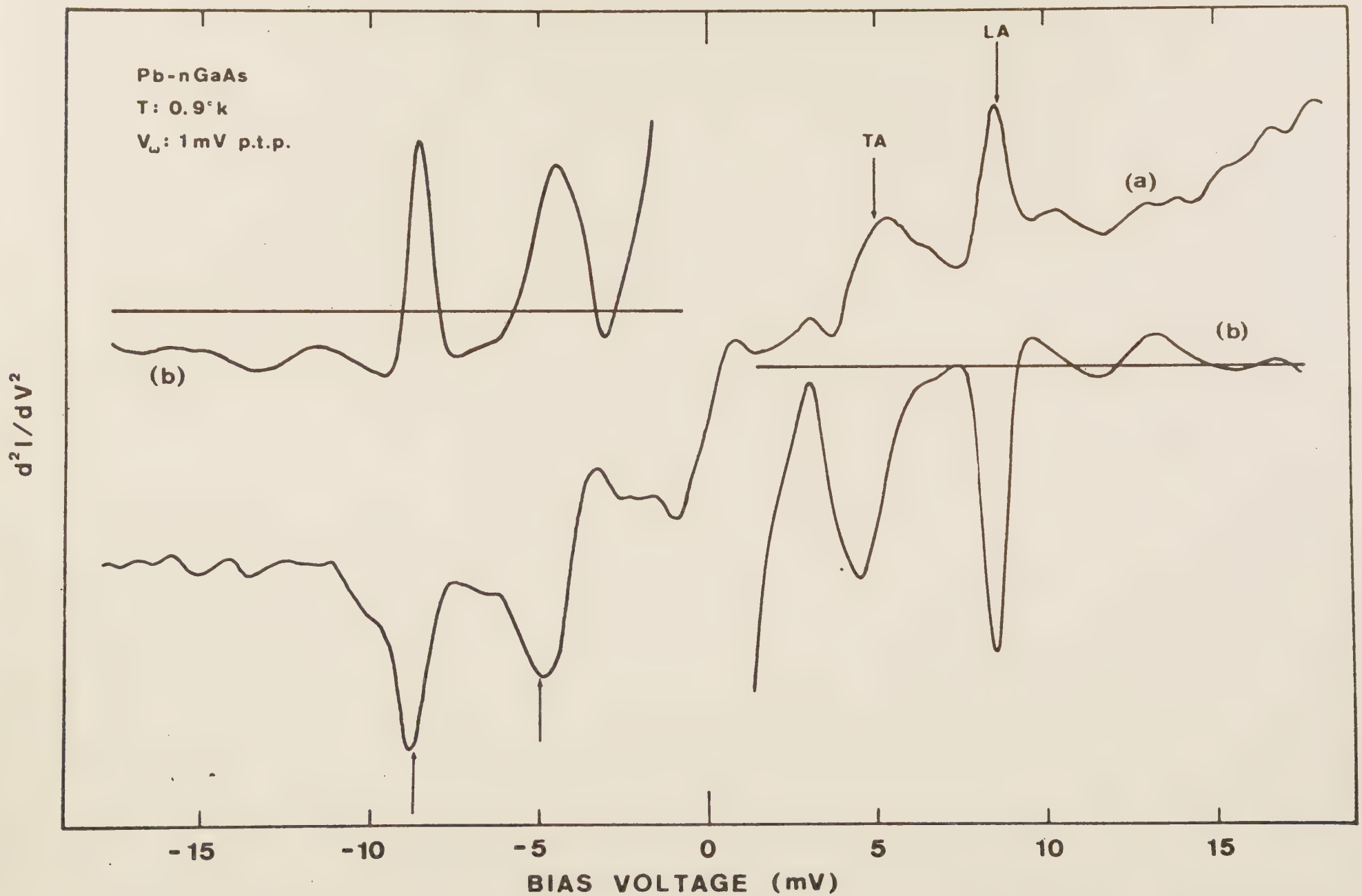

Pb-nGaAs
T: 0.9°k
V_ω: 1mV p.t.p.
LA
TA
(a)
(b)
(b)
d^2I/dV^2
-15
-10
-5
0
5
10
15
BIAS VOLTAGE (mV)

Figure 12

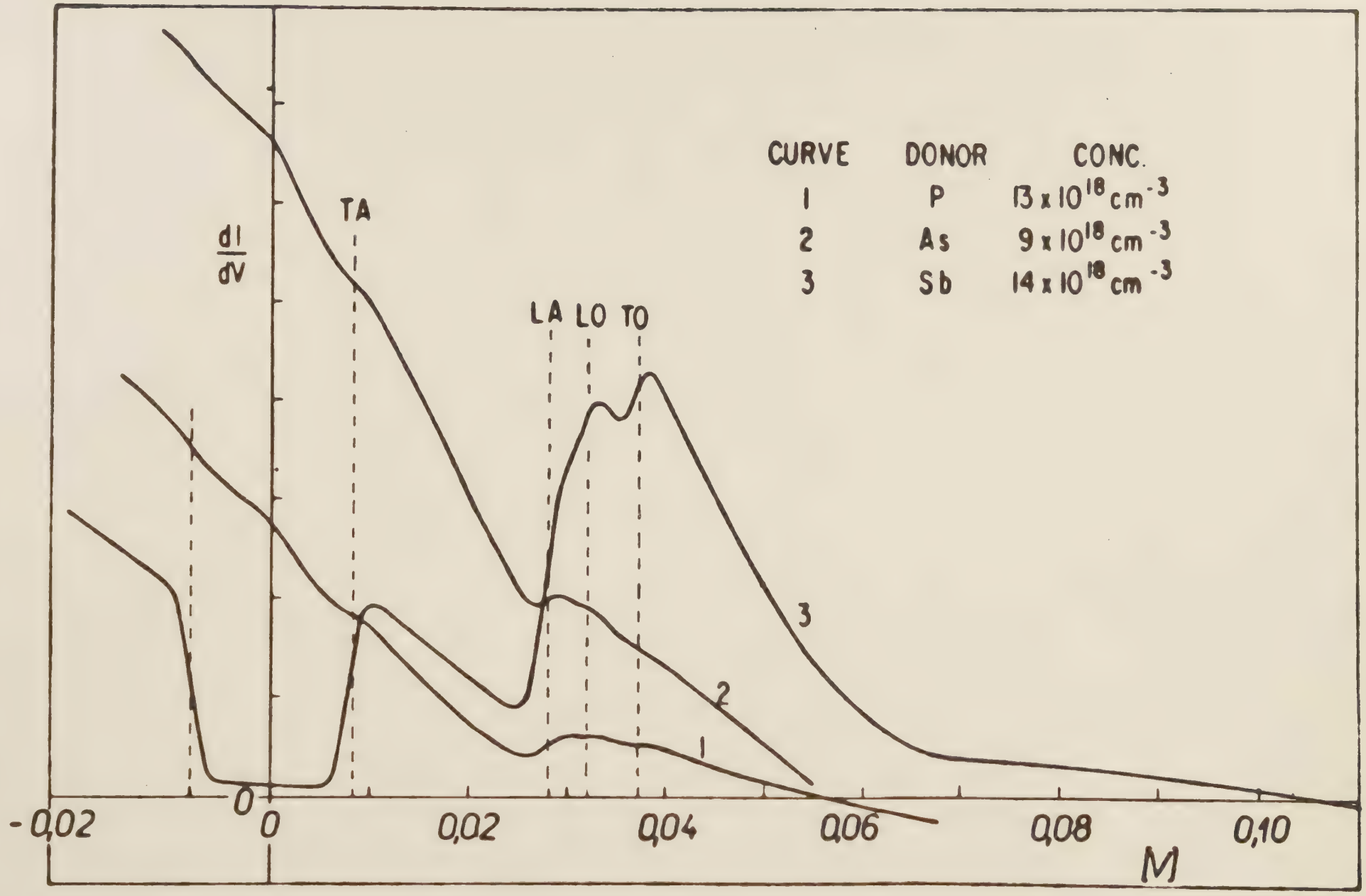

CURVE DONOR CONC.
1 P 13 x 10^18 cm^-3
2 As 9 x 10^18 cm^-3
3 Sb 14 x 10^18 cm^-3
dI/dV
TA
LA LO TO
3
2
1
0
-0,02
0
0,02
0,04
0,06
0,08
0,10
M

Figure 13

Plomb	M.I.M.	M.S. chimique	M.S. clivée
$\Delta G/G$	6×10^{-3}	1.2×10^{-3}	5×10^{-4}

Tableau III

La seule interprétation satisfaisante de ces phénomènes a été présentée par Caroli - Combescot - Nozières - St James [16]. Leur formalisme rigoureux permet d'évaluer la contribution de l'interaction électron-phonon dans l'électrode et dans la barrière. L'origine de ces effets provient de la pénétration dans la barrière des phonons du métal et de leur interaction avec les électrons qui font tunnel. Ils prévoient une contribution essentiellement "dissipative" correspondant à une augmentation paire de conductance. L'amplitude de ces phénomènes est déterminée par les propriétés de la barrière et principalement par l'adaptation acoustique entre les deux matériaux. Ceci explique les variations observées suivant le type des structures.

III - 3. Phonons de bord de zone de Brillouin

D'importantes structures correspondant à l'énergie des phonons de bord de zone ont été observées dès 1957 dans les diodes p-n tunnel réalisées sur des matériaux à gap indirect, germanium par exemple. L'émission de phonons (111) à basse température permet aux électrons de passer des vallées L du coté n à $k \sim k_o$ au haut de la bande de valence (du coté p) à $k \sim 0$. Les structures associées s'observent clairement dans le cas du Ge[14] dopé à l'antimoine (fig. 13).

Aux polarisations correspondant à l'énergie des phonons (111) de chaque bande TA, LA, LO, TO, on observe des augmentations brusques de conductance. L'effet est pair et les amplitudes sont voisines en direct et en inverse. Le tableau IV donne la valeur G_{LA}/G pour divers dopages et plusieurs types d'impuretés.

.../...

Matériau	Dopant	Dopage cm^{-3}	G_{LA}/G
Ge	Sb	1.4×10^{19}	~ 40
Ge	As	9×10^{18}	~ 0.1
Ge	P	1.3×10^{19}	~ 0.2

Tableau IV

Le cas des diodes p-n est particulièrement intéressant comme nous l'avons déjà mentionné car le courant de background est essentiellement dû aux fluctuations de potentiel.

Un effet analogue a été mis en évidence dans des contacts métal-semiconducteur au germanium [12]. Dans ces structures, l'effet tunnel spéculaire peut en principe avoir lieu car le moment de Fermi du métal est, dans les cas favorables, supérieur à $k_{o//}$, composante de k_o dans le plan parallèle à la jonction. Aucune preuve expérimentale n'a permis jusqu'à présent de mettre en évidence un cas contraire.

Outre cette conductance spéculaire, on observe, cette fois encore, des augmentations brusques de conductance correspondant aux energies des phonons de bord de zone de Brillouin. L'amplitude $\Delta G/G$ de ces effets est beaucoup plus faible que dans les diodes p-n. Ceci est évidemment dû au fait que le processus spéculaire de background est permis dans les contacts M.S.. La figure 14 montre que l'amplitude de ces effets est pratiquement la même en direct et en inverse et la tableau V rapporte les valeurs numériques obtenues par différents auteurs à pression ambiante.

.../...

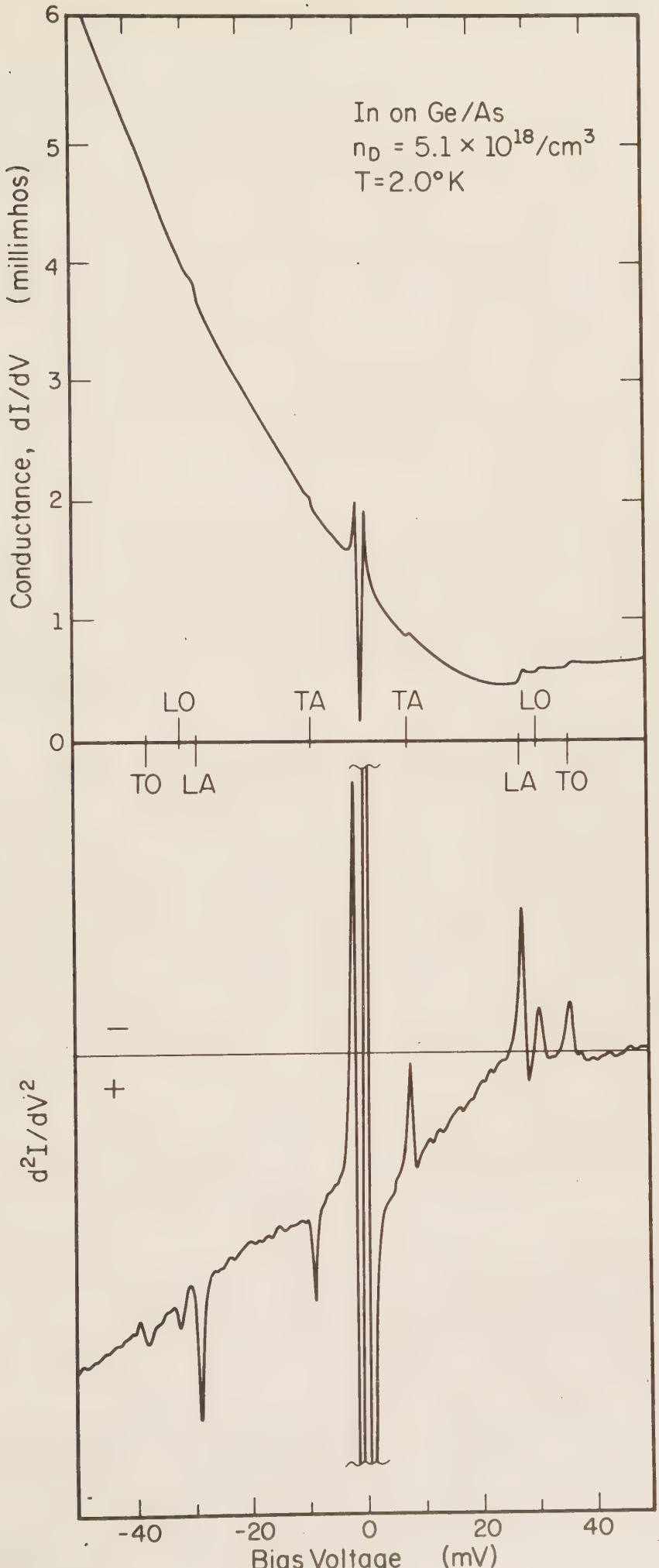

In on Ge/As
$n_D = 5.1 \times 10^{18}/cm^3$
T=2.0°K
Conductance, dI/dV (millimhos)
6
5
4
3
2
1
0
LO
TA
TA
LO
TO
LA
LA
TO
−
+
d^2I/dV^2
-40
-20
0
20
40
Bias Voltage (mV)

Figure 14

Auteurs	Dopant	Dopage (cm^{-3})	G (Ω^{-1})	G_{LA}/G (%)
Davis et Steinrisser [12]	Sb	6.7×10^{18}	3.8×10^{-3}	10
"	As	5.1×10^{18}	10^{-3}	10
Guétin - Schreder	As	9.8×10^{18}	10	2

Tableau V

L'expérience montre que $\Delta G/G$ est pratiquement indépendant du type d'impuretés mais non du niveau de dopage ni de la pression. On peut noter de plus que l'amplitude relative des pics en dérivée seconde est différente de celle qui est observée dans les diodes p-n.

Nous avons observé des processus analogues dans le n-GaSb à haute pression [13], c'est-à-dire lorsque le gap est indirect. Nous avons ainsi pu suivre l'évolution de l'amplitude de ces effets en relation avec une modification contrôlée de la structure de bandes. Ces effets apparaissent dès que le gap devient indirect ($P > P_0$) et leur amplitude en direct présente un maximum lorsque la vallée Γ cesse totalement de contribuer de façon directe ($P \sim P_1$). A pression supérieure l'amplitude décroît lentement.

La figure 15 montre en inverse un phénomène nouveau particulièrement intéressant. La pression utilisée correspond dans ce cas à $\Delta E < \mu_F + \hbar\omega_0$.

Lorsque $\Delta E > \mu_F + \hbar\omega_0$, la structure de phonon $\hbar\omega_0$ apparaît comme un creux de dérivée seconde et correspond donc à une augmentation brusque de conductance comme dans le cas du germanium (fig. 14). Par contre, si $\Delta E < \mu_F + \hbar\omega_0$, la structure de phonons en inverse possède une forme toute différente. Elle comporte, en dérivée seconde, un léger creux en-deça de l'énergie

.../...

$\hbar\omega_o$ et un pic plus important au-delà. Elle correspond vraisemblablement à un faible pic local de conductance superposé à une diminution brusque de conductance. Le pic local reflète la partie dite "dispersive" de la self-énergie. La partie dite "dissipative" si elle existe, ne peut ici être que négative (diminution de conductance). Si cette description peut être discutée, il est clair néanmoins qu'en aucune façon la forme de ligne ne peut être attribuée à un effet "dissipatif" positif correspondant à l'augmentation habituelle de conductance. Ce dernier cas est celui du germanium et celui de n-GaSb en direct et en inverse lorsque $\Delta E > \mu + \hbar\omega_o$.

Bien que le rôle joué par les phonons de bord de zone dans un semiconducteur indirect ait été perçu dès 1959, divers modèles théoriques concernant les diodes p-n ont été proposés jusqu'en 1965. Ces modèles ont été revus et discutés avec précision par Kleinman[17] aussi n'y reviendrons-nous pas. Ils ont pour point commun de calculer le courant dû aux phonons en perturbation à l'ordre le plus bas du couplage électron-phonon entre les états propres du système n et du système p en présence de la barrière. La relative complexité de la bande de conduction permet d'imaginer un certain nombre de possibilités impliquant des états intermédiaires variés. Outre le mécanisme proposé par Kleinman, tous ces modèles conduisent à des conductances trop faibles par quelques ordres de grandeur. Nous ne rappelons ici que le traitement de cet auteur et son extension aux contacts M.S. effectuée par Davis et Steinrisser[12].

- Modèle de Kleinman (1965)

Suivant la méthode utilisée par ses prédécesseurs, Kleinman exprime que le courant tunnel est proportionnel au taux de transition par unité de temps d'états de gauche ψ_G vers des états de droite ψ_D. Ces transitions sont induites par le couplage électron-phonon H_{el-ph} :

$$J = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{k_G} \sum_{k_D} \sum_{\text{phonon}} | < \psi_G (k_G) | H_{el-ph} | \psi_D (k_D) > |^2$$

$$\times (f_G - f_D)\, \delta (E_G - E_D \pm \hbar\omega_{ph})$$

.../...

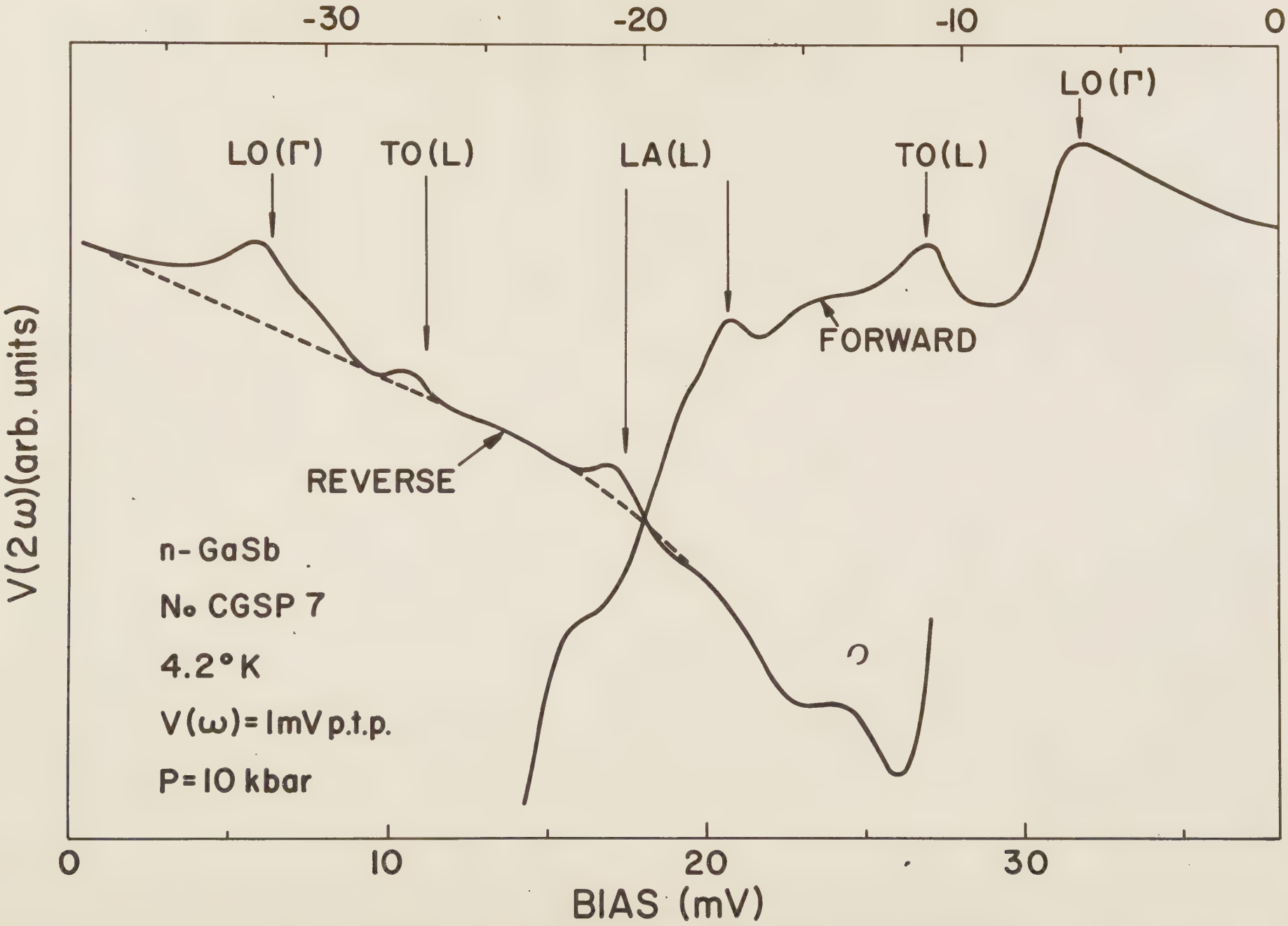

-30
-20
-10
0
LO(Γ)
TO(L)
LA(L)
TO(L)
LO(Γ)
FORWARD
REVERSE
n-GaSb
No CGSP 7
4.2°K
V(ω)= 1mV p.t.p.
P= 10 kbar
V(2ω)(arb. units)
0
10
20
30
BIAS (mV)

Figure 15

$\hbar\omega_{ph}$ est l'énergie du phonon absorbé ou émis, k_D (k_G), $E_D(E_G)$ et f_D (f_G) représentent respectivement le vecteur d'onde de l'état électronique, l'énergie de cet état et son occupation pour le système de droite (gauche). Le champ électrique de la jonction donne lieu à un mélange des états propres correspondant à la bande de valence et aux différentes vallées de la bande de conduction et il existe donc un grand nombre de combinaisons de ces états donnant lieu a un courant non nul. Deux cas principaux sont étudié :

1) - $\psi_G = \psi_L$
$\psi_D = \psi_v$
où l'indice L se rapporte aux ellipsoïdes de la bande de conduction du germanium et v se rapporte aux états du haut de la bande de valence.
Le courant correspondant est inférieur au courant observé par environ trois ordres de grandeur.

2) - L'autre processus consiste à considérer que l'électron fait tunnel de la bande de valence du coté p vers un état intermédiaire de la vallée Γ (centre de zone) du coté n et transite ensuite vers les vallées L en émettant un phonon de bord de zone de Brillouin. La traversée de la barrière s'effectue ainsi avec les caractéristiques de la vallée Γ à masse légère. Le coéfficient de transmission est donc plus grand et le calcul effectué par Kleinman mène à un courant assisté par phonons qui est du bon ordre de grandeur.

- Adaptation aux contacts M.S. (type n)

Le formalisme établi par Davis reprend les traits essentiels de celui de Kleinman excepté le fait que les états propres du système p sont remplacés par ceux du métal de l'électrode à $k \sim 0$ qui pénètrent de façon non négligeable à l'intérieur du semiconducteur. Le calcul peut être traité exactement dans ce type de barrière et les valeurs calculées sont en accord satisfaisant avec les résultats expérimentaux obtenus dans le cas du germanium dopé à l'antimoine.

.../...

Ces modèles, qui seront discutés dans la quatrième partie, n'ont pas considéré le cas $\Delta E < \mu_F + \hbar\omega_o$. Nous verrons que le formalisme exposé en quatrième partie nous permet non seulement de retrouver les résultats de ces modèles, mais encore, contrairement à ceux-ci, d'expliquer la forme des effets observés en inverse lorsque $\Delta E < \mu_F + \hbar\omega_o$.

III - 4. Phonons optiques de centre de zone

Comme les diodes p-n et les structures M.I.S., les contacts M.S. présentent, pratiquement pour tous les semi-conducteurs, des anomalies de conductance localisées approximativement au voisinage des énergies de phonons optiques de centre de zone[18]. La forme de ces anomalies dépend sensiblement du matériau et du type de structure employés. Nous nous limitons principalement aux contacts M.S. réalisés sur les matériaux de type n suivants : n-GaAs et n-GaSb.

Bien que le n-GaAs ait été étudié par un certain nombre d'auteurs, nous avons effectué une spectroscopie fine de la structure de phonon optique dans différentes conditions de dopage et de barrière.

La forme de cette structure en direct et en inverse est présentée dans la figure 16 a différentes températures. Nous avons placé des flèches aux énergies de phonons LO(000) et TO(000) mesurées a basse température dans un matériau pur par des techniques optiques.

Nous n'avons pu mettre en évidence une modification significative de la forme de ces structures en fonction du mode de préparation des contacts, du dopage, de la hauteur de barrière et de la pression jusqu'à 17 kbars. Seule l'amplitude $\Delta G/G$ varie légèrement suivant les conditions expérimentales. En direct la raie est constituée d'un creux suivi d'un pic, ce qui correspond a un creux local de conductance : l'effet est essentiellement

.../...

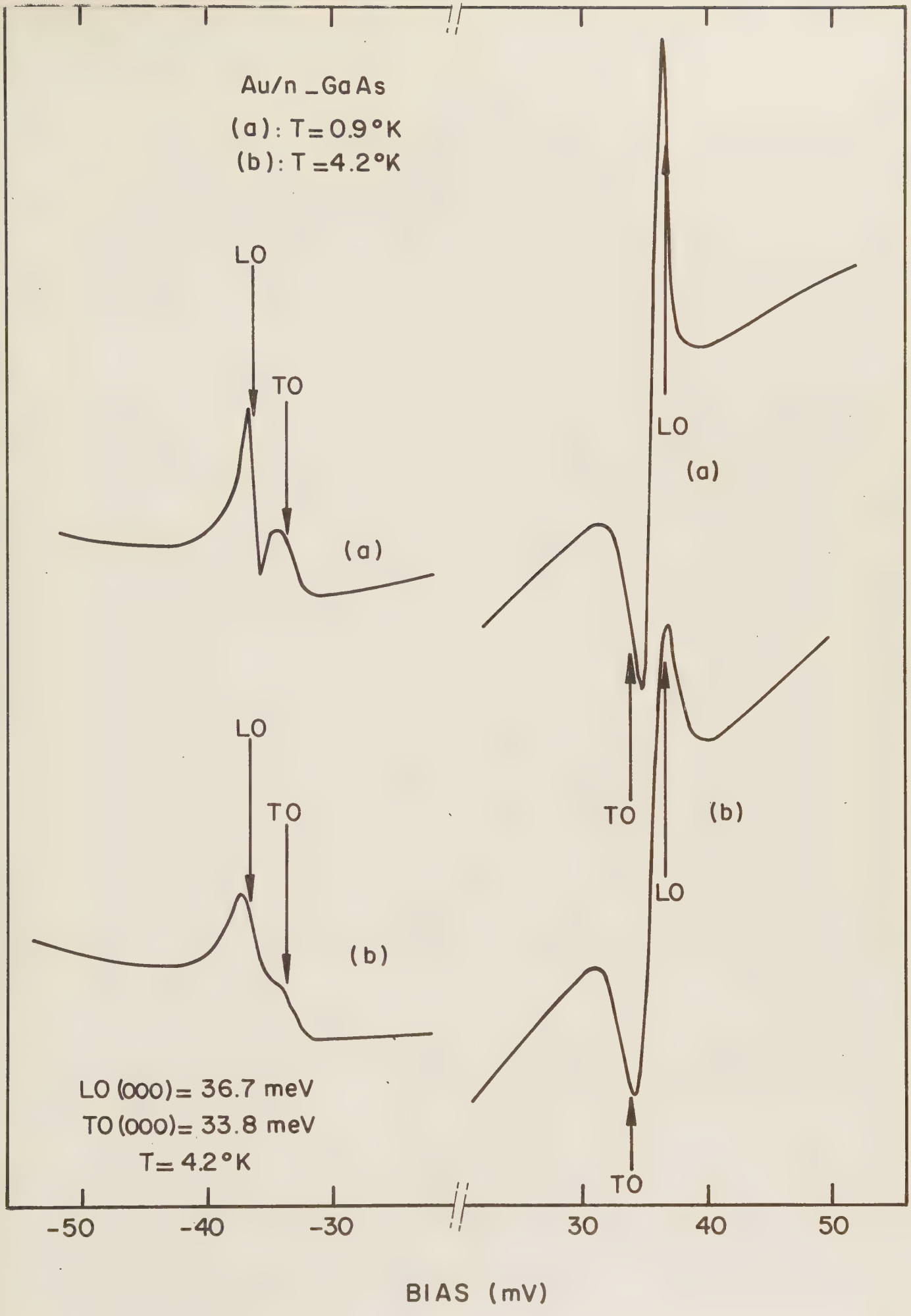

Au/n_GaAs
(a): T=0.9°K
(b): T=4.2°K
LO
TO
(a)
LO
TO
(b)
LO
TO
(a)
TO
LO
(b)
LO (000)= 36.7 meV
TO (000)= 33.8 meV
T= 4.2°K
-50
-40
-30
30
40
50
BIAS (mV)

Figure 16

"dispersif". En inverse et dans les meilleures conditions de résolution, elle est constituée de deux pics proches et correspond ainsi a deux diminutions successives de la conductance. Le background est cependant moins évident à extraire en inverse qu'en direct. L'amplitude des structures de phonons optiques est typiquement de l'ordre du pourcent et leur largeur à mi-hauteur peut être estimée à 3 meV.

Quelques remarques concernant les valeurs d'énergie observées peuvent être formulées. L'énergie des phonons transverses optiques ne dépend pas du niveau de dopage. Dans un matériau polaire dégénéré, les porteurs libres écrantent plus ou moins le champ électrique créé par les phonons longitudinaux optiques. Il en résulte que l'énergie de ces phonons à faible vecteur d'onde tend vers l'énergie des phonons transverses optiques lorsque $q \to 0$. On peut considérer que l'énergie des phonons LO est affaiblie si $q \lesssim k_s$ où k_s est la constante d'écran. Dans la mesure où le vecteur d'onde des phonons LO donnant lieu à l'anomalie de conductance est inférieur à k_s, il devrait être possible, en principe, d'utiliser cette remarque pour déterminer si les phonons sont émis dans la barrière ou dans l'électrode semiconductrice. La figure 16 montre que la raie observée à basse température présente deux pics séparés dont la position correspond de façon précise aux énergies de phonons LO et TO du GaAs pur. Ceci suggère, d'une part que les phonons transverses participent à la structure, et de l'autre que les interactions qui lui donnent naissance proviennent d'une région du semiconducteur dans laquelle l'écrantage par les porteurs libres est inefficace.

Le n-GaSb possède des caractèristiques très voisines de celles du GaAs. Par contre sa structure de bandes apporte une modification essentielle dont nous avons étudié les effets par l'application de hautes pressions hydrostatiques. A la pression ambiante, la forme et l'amplitude des structures de phonons optiques sont tout-à-fait analogues à celles que l'on observe dans le n-GaAs. Ceci n'est pas étonnant en raison de la similitude des paramètres de ces deux matériaux.

L'application de la pression nous a permis d'observer, pour la première fois, des modifications importantes de la forme de raies. Ces mesures n'ont pu être effectuées qu'à 4.2°K avec une électrode supraconductrice (Pb). La résolution ne permet pas dans ces conditions de mettre en évidence la structure fine éventuelle de la raie en polarisation inverse.

La forme et l'amplitude de la raie en inverse ne sont pratiquement pas modifiées sous pression (fig. 17). Cette structure est essentiellement constituée d'un pic de dérivée seconde, de la même façon qu'à pression ambiante dans des conditions de résolution semblables. En direct, par contre, le pic de dérivée seconde disparait assez rapidement pour ne laisser qu'un creux situé à $eV < \hbar\omega_o$ (fig. 17). Au delà de 8 kbars la dégénérescence de la vallée Γ devient inférieure à l'énergie du phonon LO et la raie en direct devient un pic simple à l'énergie $\hbar\omega_o$. L'effet est purement "dissipatif" et correspond à une augmentation brusque de la conductance. Nous tenterons d'interpréter ces formes dans la quatrième partie et dès à présent on peut noter que les modifications de structure de bande et de la dégénérescence de Fermi des deux types de vallée mettent en évidence de nombreux effets aussi bien sur le background que sur les anomalies dues aux interactions.

Des formes analogues comportant de toute évidence des parties "dispersives" de même signe ont été observées par exemple dans le n-Si, p-Si, n-CdS, p-Ge, p-GaAs et n-Ge par nous-mêmes. Sans entrer dans le détail, nous pouvons avancer que, de façon très générale, la partie "dispersive" correspond toujours à un creux (pic) local de la conductance en direct (inverse). Il est plus délicat d'attribuer un signe à la partie dissipative sauf en direct dans le cas où $\mu_F < \hbar\omega_o$, cas où elle correspond toujours à un saut positif de conductance.

L'essentiel du travail théorique concernant ces effets de phonons optiques a été effectué par Davis et Duke[19,20].

.../...

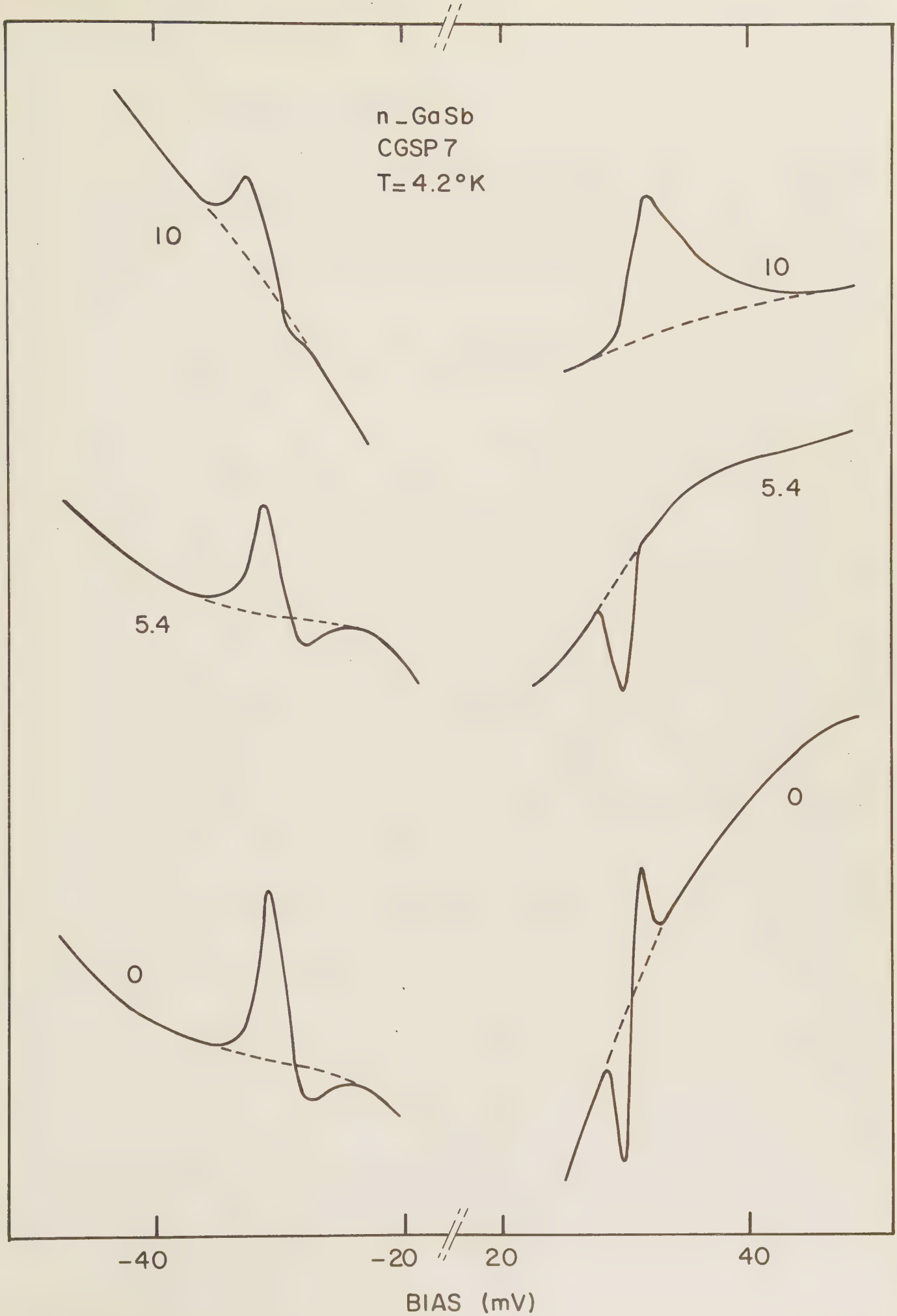


Figure 17

- Méthode de Davis et Duke[19]

Ces auteurs utilisent la généralisation de la théorie de l'hamiltonien tunnel en introduisant des interactions dans le volume de l'électrode semiconductrice. Le coefficient D est supposé inchangé et l'on peut alors généraliser la formule du chapître 2 :

$$J = \frac{2eA}{\pi h} \int d\omega \left[f_R(\omega) - f_L(\omega) \right] \int d\xi_k \, \mathrm{Im}G^R(\xi_k,\omega) \times$$

$$\int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} \, D(k_{//}, \omega, V)$$

où $\xi_k = \frac{h^2k^2}{2m^*}$ et $\mathrm{Im}G^R(\xi_k,\omega)$ est la partie imaginaire de la fonction de Green retardée dans le volume du semiconducteur.

Le modèle des électrons libres peut être obtenu en faisant $\mathrm{Im}G^R(\xi_k,\omega) = \pi\delta(\xi_k-\omega)$. Notons dès à présent que ce modèle exclue les interactions dans la barrière et ne tient pas compte de la modification de la fonction de Green au voisinage de la barrière. Sans en expliquer la raison, ces auteurs avancent que la partie dissipative de la self-énergie est peu importante et illustrent l'essentiel de leurs résultats dans l'approximation des quasiparticules :

$$\mathrm{Im}G^R(\xi_k,\omega) = Z(\omega)\pi\delta[\xi_k - \xi(\omega)]$$

où $\xi(\omega)$ est défini par :

$$\omega - \xi(\omega) - \mathrm{Re}\Sigma[\xi(\omega), \omega] = 0$$

et $$Z(\omega) = (1 + \partial\Sigma/\partial\xi_k)^{-1}_{\xi_k = \xi(\omega)}$$

Σ est la self énergie des phonons.
$Z(\omega)$ est appelé le facteur de renormalisation.

On voit alors que si Σ est indépendant du vecteur

.../...

d'onde $\vec{k}$, $Z(\omega) = 1$ et l'effet provient entièrement du fait que la relation de dispersion des électrons est modifiée par la présence de $Re\Sigma(\omega)$. Les auteurs en déduisent que la seule façon dont le courant tunnel peut refléter l'interaction électron-phonon provient du domaine d'intégration sur les $k_{//}$.

- sans interaction $$\int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} = \rho_{//} \int_0^{\omega} dE_{//}$$

- avec interaction $$\int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} = \rho_{//} \int_0^{\omega - Re\Sigma(\omega)} dE_{//}$$

où $\rho_{//} = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}$ est la densité d'états bidimensionnelle. Ce modèle simplifié prédit une diminution (augmentation) locale de la conductance en direct (inverse) qui reflète la singularité de $Re\Sigma$ à $\hbar\omega_o$ au-dessous(au-dessus) du niveau de Fermi du semiconducteur.

Outre les points soulevés plus haut, il est clair que l'omission des processus dissipatifs n'est pas convenablement justifiée et que l'interprétation proposée prédit une absence d'anomalie LO en direct lorsque $\mu_F < \hbar\omega_o$ et, aux deux sens de polarisation, quand $\mu_F \pm \hbar\omega_o \gg E_o$. Dans ce dernier cas, en effet, il est clair que la contribution des termes de très grand $k_{//}$ ($E_{//} \sim \omega$) est parfaitement négligeable . Tout comme dans un métal, la somme correspondante peut être étendue de 0 à l'infini. Les résultats expérimentaux obtenus sur des matériaux tels que le GaAs et le GaSb montrent au contraire que ces structures sont bien présentes avec une amplitude relativement importante. Comme ces auteurs le mentionnent, ces matériaux sont partiellement polaires et la self-énergie due au couplage électron-phonon polaire n'est pas indépendante de $\vec{k}$. Le modèle simplifié n'est donc pas adéquat. Mahan et Duke[21] ont calculé la densité d'états renormalisée $Z(\omega)$ pour un couplage polaire écranté et obtiennent des singularités à $\omega = \mu_F \pm \hbar\omega_o$, mais de signe tel que la conductance tunnel devrait présenter des anomalies de phonons de signe opposé, c'est-à-dire un pic local

en direct et un creux local en inverse. Le modèle de Davis et Duke ne permet donc pas d'interpréter les résultats obtenus sur des matériaux à grande dégénérescence ($\mu_F \pm \hbar\omega_o \gg E_o$). Mentionnons enfin que ces auteurs ont adapté le même modèle au traitement des interactions électron-électron donnant lieu aux structures de plasmon couramment observées.

- Méthode de Davis [20]

Davis utilise l'approche de Appelbaum et Brinkman[22] qui n'est pas fondée sur la théorie de l'hamiltonien tunnel et qui utilise les fonctions de Green du problème de gauche et du problème de droite suivant la dénomination usuelle. Cette théorie a été clairement discutée par R. Combescot [4] et nous ne nous attacherons qu'à l'utilisation que Davis en a faite. L'amélioration essentielle que comporte ce modèle par rapport à celui de Davis et Duke tient au fait qu'il tient compte des modifications de la self-énergie au voisinage de la barrière. La méthode peut se résumer au calcul des fonctions de Green du semiconducteur en présence de barrière et de l'interaction électron-phonon. Le couplage électron-phonon est traité en perturbation a l'ordre le plus bas. Si les bases de la théorie sont quelque peu confuses, il est clair que ce formalisme se rapproche de très près de celui que nous présenterons en 4ème partie. Les résultats du calcul effectué pour le silicium de type p prédisent un effet dispersif de signe convenable et un effet dissipatif faible positif en direct et négatif en inverse. L'émission de phonons dans la barrière n'est pas considérée.

III - 5. Conclusions

Outre les effets de plasmons et les structures situées au voisinage de V = 0, l'essentiel des "anomalies" de conductance peut être attribué aux interactions électron-phonon. Si les effets de phonons des métaux normaux semblent refléter plus ou moins bien leur densité d'états totale, il est clair que les structures de phonons du semiconducteur correspondent soit au centre de zone,

.../...

soit au bord de zone de Brillouin. Dans le premier cas, seuls les phonons optiques interviennent. Comme nous l'avons vu, les modèles théoriques sont de nature très différente et leur justification peut être discutée [4]. Quelle que soit la validité de ces modèles en ce qui concerne les phénomènes d'électrodes, ils sont de toute évidence mal adaptés au traitement des interactions intervenant à l'intérieur de la barrière. Nous présentons dans la partie suivante un traitement rigoureux et compact de ces effets aussi bien que de ceux qui sont liés à la présence d'impuretés ionisées dans le semiconducteur.

.../...

IV - CALCUL DIRECT DU COURANT TUNNEL

IV - 1. Rappel et formalisme général

Nous avons mis en évidence, au cours de cet exposé, un certain nombre de points expérimentaux et théoriques qui demeurent à présent soit irrésolus soit difficilement explicables dans le cadre des modèles habituels. Nous nous limiterons par la suite à deux problèmes essentiels : l'influence des fluctuations de potentiel et celle de l'interaction électron-phonon sur le courant tunnel dans un contact métal-semiconducteur. Cette quatrième partie a pour objectif de présenter un formalisme général compact permettant de poser ces problèmes de façon claire et éventuellement d'en résoudre un certain nombre. Nous avons, dans ce but, adapté la théorie de Caroli, Combescot, Nozières et Saint-James[5] au cas du contact metal-semiconducteur. Nous ne rappelons ici que les principes de la théorie établie par ces auteurs, leurs hypothèses et les ingrédients nécessaires à un traitement rigoureux. Bien que nous ne nous intéressions ici qu'aux semiconducteurs de type n, l'ensemble de ce qui suit peut être transposé à ceux de type p.

La propagation des électrons est décrite en termes de pseudofonctions de Wannier localisées sur chaque site atomique et, pour simplifier, nous supposons que seule une bande d'énergie est impliquée : la bande de conduction. Nous lèverons éventuellement cette hypothèse lorsque la nécessité s'en fera sentir ($V_b > E_g/2$). L'hamiltonien du système total se décompose alors naturellement en hamiltoniens de gauche H_g (métal), de droite H_d (semiconducteur) et de couplage H_c. Dans le but de calculer le courant traversant le contact lorsqu'une polarisation finie est appliquée, nous effectuons une partition fictive du système que nous plaçons de façon naturelle, à l'interface métal-semiconducteur. Le courant a travers cette partition s'écrit :

.../...

$$J = \frac{ie}{\hbar} \sum_{\alpha,a} T_{\alpha a} [C_\alpha^+ C_a - C_a^+ C_\alpha]$$

C_i^+ et C_i sont respectivement les opérateurs création et annihilation d'un électron sur le site i. Les lettres grecques (latines) se rapportent aux sites situés à gauche (droite) de la partition. $T_{\alpha a}$ représente l'élément de matrice de l'hamiltonien de couplage entre les états de base correspondant au site α et au site a. Pour calculer $< J >$, valeur moyenne de l'opérateur courant, la jonction est polarisée au temps $t = -\infty$, H_c est établi adiabatiquement. Le résultat final est obtenu en traitant T en perturbation à tous les ordres. L'irréversibilité du processus tunnel impose l'utilisation de la méthode de perturbation de Keldysh[23]. Il est commode d'introduire quatre types de fonctions de Green :

- Les densités spectrales $\mathcal{G}_{ij}^+(t,t')$ et $\mathcal{G}_{ij}^-(t,t')$ qui renferment l'information relative à l'occupation des états d'électrons et de trous.
- Les fonctions retardée et avancée $\mathcal{G}_{ij}^r(t,t')$ et $\mathcal{G}_{ij}^a(t,t')$ qui renferment l'information relative à la distribution des états disponibles.

$\mathcal{G}_{ij}^+(t,t')$ est, par exemple, définie par

$$\mathcal{G}_{ij}^+(t,t') = i < C_j^+(t') C_i(t) >$$

L'équation de Dyson habituelle est remplacée par les équations suivantes qui seront utilisées par la suite pour différentes formes de self-énergie Σ :

$$\mathcal{G}^r = \mathcal{G}_o^r + \mathcal{G}_o^r \Sigma^r \mathcal{G}^r$$

$$\mathcal{G}^\pm = (1 + \mathcal{G}^r \Sigma^r) \mathcal{G}_o^\pm (1 + \Sigma^a \mathcal{G}^a) + \mathcal{G}^r \Sigma^\pm \mathcal{G}^a$$

La self-énergie associée à T est telle que :

$$^T\Sigma_{ij}^r = {}^T\Sigma_{ij}^a = T_{ij} \text{ et } {}^T\Sigma_{ij}^+ = {}^T\Sigma_{ij}^- = 0.$$

.../...

La valeur moyenne du courant s'écrit alors :

$$\langle J \rangle = \frac{e}{\hbar} \sum_{\alpha,a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} T_{\alpha a} \left[\mathcal{G}^{+}_{a\alpha}(\omega) - \mathcal{G}^{+}_{\alpha a}(\omega)\right]$$

où $\mathcal{G}_{ij}(\omega)$ est la transformée de Fourier de $\mathcal{G}_{ij}$ par rapport au temps. Le problème se réduit au calcul de $\mathcal{G}^{+}(\omega)$, le propagateur complet, en fonction de T et des propagateurs g des deux parties isolées et séparément en équilibre thermodynamique. Nous supposons que le métal est invariant par translation dans un plan parallèle à celui de la jonction. Dans l'ignorance de la structure exacte de l'interface, nous supposons de plus que $T_{\alpha a}$ ne dépend des coordonnées α et a dans ce plan que par leur différence $\alpha_{//} - a_{//}$. En quelque sorte, nous supposons que l'interface est invariante par translation et nous négligeons le désaccord de maille cristalline entre les deux réseaux. Par contre, le semiconducteur renferme des impuretés ionisées localisées et n'est pas invariant par translation. Le courant peut être exprimé en termes de transformées de Fourier partielles

$$g_{i_x j_x}(k_{//},\omega) = \sum_{i_{//}-j_{//}} g_{ij}(\omega) \exp -ik_{//}(i_{//}-j_{//})$$

$$T_{i_x j_x}(k_{//}) = \sum_{i_{//}-j_{//}} T_{ij} \exp -ik_{//}(i_{//}-j_{//})$$

$$\mathcal{G}_{i_x j_x}(k_{//},k'_{//},\omega) = \sum_{i_{//},j_{//}} \mathcal{G}_{ij}(\omega) \exp -ik_{//}i_{//} \exp ik'_{//}j_{//}$$

Les transformées de Fourier inverses s'écrivent alors :

$$g_{ij}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{k_{//}} g_{i_x j_x}(k_{//},\omega) \exp ik_{//}(i_{//}-j_{//})$$

$$\mathcal{G}_{ij}(\omega) = \frac{1}{N^2} \sum_{k_{//}} \sum_{k'_{//}} \mathcal{G}_{i_x j_x}(k_{//},k'_{//},\omega) \exp ik_{//}i_{//} \exp -ik'_{//}j_{//}$$

.../...

où N est le nombre de sites atomiques dans une surface S; $S = N\varepsilon^2$ où ε est la distance interatomique. Si nous supposons que la seule façon de traverser la partition consiste à utiliser un élément de matrice de transfert T, nous pouvons extraire $g^{\pm}_{\alpha\alpha}$ pour l'électrode de gauche à partir de $\mathcal{G}^{+}_{a\alpha}$ et $\mathcal{G}^{+}_{\alpha a}$. En raison du caractère localisé des pseudofonctions de Wannier, il est légitime de ne considérer que les deux plans atomiques les plus voisins situés de part et d'autre de la partition. Sans être essentielle, cette approximation simplifie beaucoup l'expression du courant qui s'écrit :

$$\langle J \rangle = \frac{e}{\hbar}\,\varepsilon^2 \int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2}\,|T(k_{//})|^2 \int \frac{d\omega}{2\pi}\,[g^{+}_{\alpha_x\alpha_x}(k_{//},\omega)\mathcal{G}^{-}_{a_xa_x}(k_{//},k_{//},\omega) - g^{-}_{\alpha_x\alpha_x}(k_{//},\omega)\mathcal{G}^{+}_{a_xa_x}(k_{//},k_{//},\omega)]$$

Les indices spatiaux tels que α_x et a_x se rapportent maintenant à des plans parallèles à la jonction . Par la suite, l'indexation x sera volontairement omise.

Il nous reste à calculer $\mathcal{G}^{\pm}_{aa}(k_{//},k_{//},\omega)$ en fonction des propagateurs du semiconducteur isolé en équilibre thermodynamique. Nous utiliserons les définitions suivantes des densités d'états aux sites α et a :

$$\rho_\alpha = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,g^{r}_{\alpha\alpha}$$

$$\rho_a = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,g^{r}_{aa}$$

Les densités spectrales obeissent alors aux relations :

$$g^{+}_{\alpha\alpha}(\omega) = 2i\pi\rho_\alpha(\omega)f_L(\omega) \qquad g^{+}_{aa}(\omega) = 2i\pi\rho_a(\omega)f_R(\omega)$$

$$g^{-}_{\alpha\alpha}(\omega) = 2i\pi\rho_\alpha(\omega)[f_L(\omega)-1] \qquad g^{-}_{aa}(\omega) = 2i\pi\rho_a(\omega)[f_R(\omega)-1]$$

.../...

où f_L et f_R sont les facteurs de Fermi dans le métal et dans le semiconducteur isolés, séparément en équilibre thermodynamique.

Notre but est de décrire le courant tunnel en terme de fonctions de Green du semiconducteur isolé. D'une façon générale, nous traiterons aussi bien les fluctuations du potentiel que l'interaction électron-phonon par un développement de perturbation. Nous désirons dès maintenant transformer les expressions en isolant le semiconducteur, autrement dit en explicitant l'élément de matrice de transfert T. Pour ceci, nous choisissons temporairement pour base de fonctions non perturbées les fonctions de Green $\mathcal{G}^{o}_{ij}$ du semiconducteur non isolé mais en l'absence de fluctuations de potentiel et de couplage électron-phonon. La fonction de Green complète s'écrit alors pour une self-énergie Σ quelconque :

$$\mathcal{G}^{r}_{aa}(k_{//},k_{//}) = N g^{r}_{aa}(k_{//}) + \mathcal{G}^{or}_{ai}(k_{//})\ \Sigma^{r}_{ij}(k_{//},k_{//})\ \mathcal{G}^{or}_{ja}(k_{//})$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{k'_{//}} \mathcal{G}^{or}_{ai}(k_{//})\ \Sigma^{or}_{ij}(k_{//},k'_{//})\ \mathcal{G}^{or}_{jk}(k'_{//})\ \Sigma^{or}_{kl}(k'_{//},k_{//})\ \mathcal{G}^{or}_{la}(k_{//})$$

$$+ \ldots$$

Nous omettons temporairement d'expliciter l'énergie ω et l'on doit sommer sur les indices répétés autres que a.

Les fonctions de Green non perturbées sont invariantes par translation dans le plan parallèle à la jonction. L'utilisation des recettes données plus haut permet d'expliciter T à tous les ordres :

$$\mathcal{G}^{o\pm}_{ai} = \Lambda^{r} g^{\pm}_{ai} + \Lambda^{r} g^{\pm}_{aa}\ T\ g^{a}_{\alpha\alpha}\ T\ g^{a}_{ai}\Lambda^{a} + \Lambda^{r} g^{r}_{aa}\ T\ g^{\pm}_{\alpha\alpha}\ T\ g^{a}_{ai}\ \Lambda^{a}$$

$$\mathcal{G}^{o\pm}_{ij} = g^{\pm}_{ij} + [\mathcal{G}^{or}_{ia}\ T\ g^{r}_{\alpha\alpha}\ T\ \mathcal{G}^{or}_{aj}]^{\pm}$$

où $\Lambda^{r,a} \equiv \dfrac{1}{1 - T^2 g^{r,a}_{aa}\ g^{r,a}_{\alpha\alpha}}$ exprime l'influence sur les fonctions de Green des excursions de part et d'autre de la partition.

.../...

Les fonctions g décrivent le semiconducteur isolé en l'absence de fluctuations de potentiel et de couplage électron-phonon. $\mathcal{G}^{o\pm}_{ja}$ s'exprime de façon analogue à $\mathcal{G}^{o\pm}_{ai}$.
Notons que les termes qui comprennent $g^{\pm}_{aa}$ ne contribuent pas car ils se compensent mutuellement dans l'expression du courant. Les diagrammes suivants indiquent que lorsque i et j sont éloignés de quelques distances atomiques de l'interface ou davantage, le second terme de chaque expression devient négligeable devant le premier. Pour $\mathcal{G}^{o\pm}_{ai}$ par exemple, nous avons

Le deuxième terme implique en supplément un aller et retour de a à i, soit typiquement un facteur d'évanescence exp $(- 2Kx_i)$ où $K \sim 10/d$. Dès que x_i est supérieur à d/10, le second terme de chaque expression est au moins dix fois plus faible que le premier. La région proche de l'interface n'intervient pas de façon importante dans les phénomènes que nous décrivons, aussi négligeons nous ces termes dès à présent. Ceci nous permet une simplification importante de l'écriture et nous autorise à poser :

$$\mathcal{G}^{\pm}_{aa}(k_{//},k_{//}) = \Lambda^{r}(k_{//})\, G^{\pm}_{aa}\,(k_{//},k_{//})\Lambda^{a}(k_{//})$$

où $G^{\pm}_{aa}(k_{//},k_{//}) = Ng^{\pm}_{aa}(k_{//}) + g^{r}_{ai}(k_{//})\,\Sigma^{r}_{ij}(k_{//},k_{//})g^{r}_{ja}(k_{//}) + \ldots$

G représente la fonction de Green <u>complète</u> du semiconducteur <u>isolé</u>. Les g, nous le rappelons, décrivent le matériau <u>isolé</u> en l'absence de fluctuation de potentiel et de couplage électron-phonon. Ces

.../...

dernières fonctions constitueront la base sur laquelle nous effectuerons le traitement de perturbation.
L'expression du courant devient :

$$\langle J \rangle = \frac{e}{\hbar} \varepsilon^2 \int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} |T(k_{//})|^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} |\Lambda^r(k_{//},\omega)|^2 \times$$
$$[g^+_{\alpha\alpha}(k_{//},\omega)\, G^-_{aa}(k_{//},k_{//},\omega) - g^-_{\alpha\alpha}(k_{//},\omega)\, G^+_{aa}(k_{//},k_{//},\omega)]$$

ou encore :

$$\langle J \rangle = \frac{4e}{\hbar} \varepsilon^2 \int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} |\tilde{T}(k_{//},\omega)|^2 \, \mathrm{Im} g^r_{\alpha\alpha}(k_{//},\omega) \mathrm{Im} G^r_{aa}(k_{//},k_{//},\omega) \times$$
$$[f_L(\omega) - f_R(\omega)] \qquad (4.1.1.)$$

où nous avons défini :

$$\tilde{T}(k_{//},\omega) = T(k_{//})\, \Lambda^r(k_{//},\omega)$$

La dépendance en ω de ce facteur n'introduit dans la conductance qu'une structure négligeable en regard de celles que les interactions provoquent dans Im G^r_{aa}, et nous la négligerons par la suite. Notons que les interactions liées à la présence de l'électrode métallique sont, en principe, incluses dans le formalisme. Seule l'interaction des électrons avec les phonons du métal à été mise en évidence expérimentalement et l'interprétation théorique en a été donnée par Caroli, Combescot, Nozières et Saint-James[16], aussi n'y reviendrons-nous pas dans cet exposé. Nous sommes ainsi ramenés uniquement au calcul de la fonction G^r_{aa} du semiconducteur isolé.

A faible polarisation, typiquement $|V| < V_{max}$, la tension correspondant à la résistance maximale, les effets de déformation de la barrière peuvent être négligés et la conductance a C°K s'obtient directement par la recette suivante :
- Supprimer l'intégration sur ω, ainsi que les fonctions d'occupation f_R et f_L ;

.../...

- Remplacer ω par $\mu_F - V$ suivant nos conventions, à savoir : $V > 0$ (direct) pour l'injection des électrons du semiconducteur vers le métal et inversement pour $V < 0$ (inverse).

Avant de rappeler quelques propriétés générales des contacts M.S. et de définir les modèles que nous utiliserons par la suite, il nous faut présenter sommairement la méthode permettant de passer à la représentation continue qui est la plus appropriée au traitement des électrons presque libres. Le système est maintenant décrit sur la base des fonctions $\delta(x-x')$ et le passage du modèle discret à la limite continue[24] s'effectue en faisant tendre la distance interatomique ε vers zéro. Sans entrer dans les détails du formalisme, nous ne mentionnons en fait que les recettes que nous utiliserons plus loin.

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon^2 T = -\hbar^2/2m_o \text{ pour des électrons libres,}$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\varepsilon^2} g^r_{ai} = \left.\frac{\partial g^r(x,y)}{\partial x}\right|_{x=0} \equiv g^{r'}(0,y)$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\varepsilon^3} g^r_{aa} = \frac{1}{2} \left.\frac{\partial^2 g^r(x,x)}{\partial x^2}\right|_{x=0} \equiv \frac{1}{2} g^{r''}(0,0) \qquad (4.1.2.)$$

où g' et g" représentent respectivement les dérivées première et seconde de la fonction de Green par rapport à la variable que l'on fait tendre ensuite vers zéro.

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon \sum_{i_x} = \int dx$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \sum_{q_x} = \frac{L}{2\pi} \int dq_x$$

Dans nos conventions nous avons de plus :

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{C}{\varepsilon^3} = n \;,\; \lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon^3 v(q) = \mathcal{V} v_c(q)$$

.../...

n est la densité de porteurs, C est la concentration et le potentiel en continu $v_c(q)$ est défini par :

$$v_c(q) = \frac{1}{V} \int d^3\vec{r} \; v(\vec{r}) \; e^{-i\vec{q}.\vec{r}}$$

Dans la représentation continue la fonction de Green du système de droite (de gauche) isolé s'écrit :

$$g(x,x',\omega) = \sum_S \frac{\psi_S^*(x)\psi_S(x')}{E_S - \omega} \qquad x > 0 \; (x < 0)$$

où ψ_S est la fonction propre du système de droite (gauche) isolé d'énergie E_S. Par définition $\psi_S(0) = 0$ ce qui entraîne $g(x,x',\omega)=0$ si x ou x' = 0.

Sans traiter formellement dans cet exposé le problème à plusieurs bandes, nous nous contentons d'indiquer la méthode suivie. La fonction de Green dans l'électrode (x > d) est calculée dans l'approximation de la masse effective car les énergies impliquées ne sont pas très éloignées de celle du bord de bande de conduction. A l'intérieur de la barrière, les bandes sont courbées et dans de nombreux cas pratiques ($V_b > E_g/2$) l'influence de la bande de valence n'est plus négligeable. Dans cette région les fonctions propres sont calculées en résolvant de façon approximative l'équation de Schrödinger en présence du potentiel de la barrière. Dans la pratique nous utilisons l'approximation de WKB et un modèle de dispersion des électrons dans le gap qui ne tient compte que de la bande de trous légers, dont la masse effective est voisine de celle des électrons de la vallée Γ dans les matériaux qui nous concernent. Plus précisément nous utilisons le modèle symétrique à deux bandes de Franz dans lequel le vecteur d'onde imaginaire dans la direction du courant est donné par l'expression :

$$k(x) = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} \; \frac{1}{Eg} \; (\bar{V}(x) - \omega_x + Eg)(\bar{V}(x) - \omega_x)\right]^{1/2}$$

où $\omega_x \equiv \omega - \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*}$, Eg est l'énergie de la bande interdite et $\bar{V}(x)$ représente le potentiel de barrière.

.../...

La valeur de la masse à faire intervenir dans l'expression de $\tilde{T}$ n'est pas connue de façon précise et dépend de la structure de bandes. Dans la mesure où nous ne sommes intéressés ici que dans la comparaison des mécanismes entre eux, nous négligerons, dans les applications numériques, les variations de $\tilde{T}$ avec le vecteur d'onde $k_{//}$ de telle sorte que son expression disparaitra des relations finales. En pratique, le formalisme est donc présenté dans un modèle a une bande et les calculs sont effectués à deux bandes lorsque la situation l'impose en utilisant la relation de dispersion de Franz.

Les fonctions de Green à une dimension sont calculées en résolvant directement l'équation différentielle qu'elles satisfont :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \bar{V}(x) - \omega\right] g^r(x,y,\omega) = \delta(x-y)$$

et en présence des conditions aux limites appropriées. L'expression de ces fonctions est donnée en Appendice A pour un modèle de barrière carrée et pour une forme de barrière quelconque dans l'approximation WKB. Notons enfin qu'aux énergies considérées et en l'absence d'interaction, les différentes vallées de la bande de conduction sont découplées. Le champ électrique de barrière peut, dans le cas particulier de l'orientation (111) établir un certain couplage. Hormis ce cas précis, il est donc clair que les fonctions de Green que nous avons choisies pour base non perturbée peuvent être séparées en termes relatifs à chacune des vallées. Nous serons ainsi amenés par la suite à séparer l'étude des processus intravallées et celle des mécanismes intervallées.

Précisons maintenant les caractéristiques des barrières M.S. que nous étudierons. Comme nous l'avons dit au début de cet exposé, le contact entre un métal et un semiconducteur comprend une distribution de charges à l'interface dont la densité et la répartition dans le plan de la jonction ne sont pas connues

.../...

de façon précise. Par la suite, nous supposerons qu'elle est uniforme et n'intervient en fait qu'en imposant le saut de potentiel à l'interface qui n'est autre que la hauteur de barrière V_b définie sur la figure 1. La courbure des bandes est imposée par la hauteur de barrière et la valeur de la dégénérescence de Fermi μ_F dans le semiconducteur. La distribution d'impuretés ionisées dans ce matériau est décrite par le potentiel $V(\vec{r})$

$$V(\vec{r}) = \sum_{\nu} v(\vec{r} - \vec{R}_\nu)$$

où $v(\vec{r} - \vec{R}_\nu)$ est le potentiel créé en $\vec{r}$ par une impureté localisée en $\vec{R}_\nu$. La description usuelle de la barrière consiste à moyenner ce potentiel dans les plans parallèles à la jonction et à considérer que les impuretés sont réparties de façon homogène dans le cristal. Le potentiel moyen de la barrière est défini par :

$$\bar{V}(x) = \frac{1}{S} \int d^2\vec{r}_{//}\, V(\vec{r})$$

où $\vec{r}_{//}$ représente la position dans un plan parallèle à l'interface et S la surface du contact. Le potentiel $\bar{V}(x)$ est calculé en résolvant l'équation de Poisson unidimensionnelle pour une répartition uniforme des impuretés ionisées de densité n, en utilisant les conditions aux limites appropriées et éventuellement en tenant compte de la présence des porteurs libres. Pour simplifier, nous négligeons ces derniers effets et le potentiel moyen est alors purement parabolique :

$$\bar{V}(x) = (2\pi e^2 n/\varepsilon_S)(x-d)^2 \qquad 0 \leqslant x < d$$

$$\bar{V}(x) = 0 \qquad x \geqslant d$$

où ε_S est la constante diélectrique statique et d est appelée largeur de zone déserte définie par :

$$d = [(\varepsilon_S/2\pi e^2 n)(V_b + \mu_F - V)]^{1/2}$$

.../...

Le point tournant $a(\omega,k_{//})$ est défini comme l'abscisse à laquelle l'énergie $\omega - \varepsilon_{//}$ de l'électron est égale à $\bar{V}(a)$. L'énergie ω est mesurée à partir du bas de la bande de conduction du semi-conducteur et $\varepsilon_{//}$ est l'énergie cinétique associée au mouvement de l'électron dans le plan de la jonction

$$\varepsilon_{//} = \hbar^2 k_{//}^2 / 2m^*$$

$$a(\omega,k_{//}) = d - [(\varepsilon_S/2\pi e^2 n)(\omega - \varepsilon_{//})]^{1/2} \leqslant d$$

Nous définissons respectivement les régions de "barrière" et d'"électrode" par :

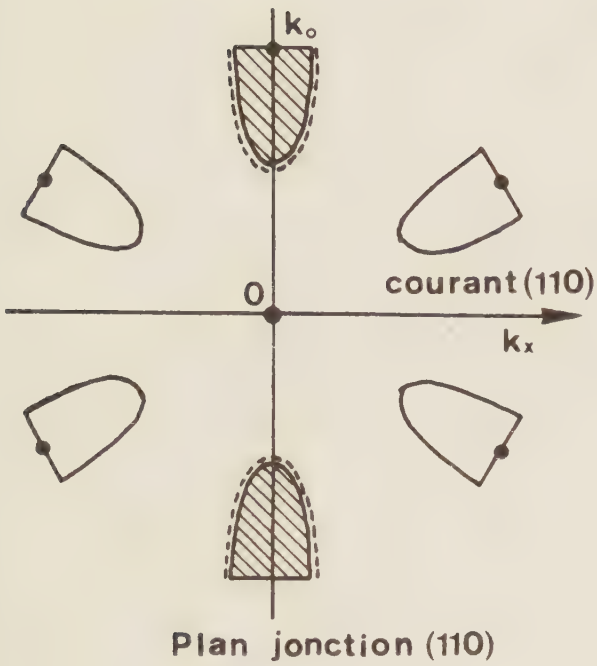
$$x < a(\omega,k_{//}) \sim d \text{ et } x > a(\omega,k_{//}) \sim d \ .$$

Dans la barrière les fonctions de Green sont évanescentes et dans l'électrode elles sont oscillantes de façon analogue aux fonctions d'onde dans les mêmes régions. En général, nous serons amenés à étudier des corps dont la bande de conduction est constituée de plusieurs vallées centrées en des points différents de la zone de Brillouin. Les schémas de la figure 10 présentent en particulier le cas du n-GaSb à différentes pressions. Pour une orientation quelconque du plan de la jonction, les fonctions d'onde correspondant aux états propres des vallées L contiennent un facteur oscillant exp i $k_{ox}x$. k_{ox} n'est autre que la projection dans la direction du courant du centre de l'ellipsoïde L dans l'espace réciproque. En d'autres termes, le moment de l'électron dans la barrière possède une partie réelle. Les calculs présentés plus loin peuvent être effectués sans difficulté pour une orientation quelconque. Nous ne traiterons explicitement cependant que le cas le plus simple où $k_{ox} = 0$, qui correspond aux ellipsoïdes L situées dans les directions parallèles au plan de la jonction. Les résultats numériques par contre tiendront compte de toutes les vallées.

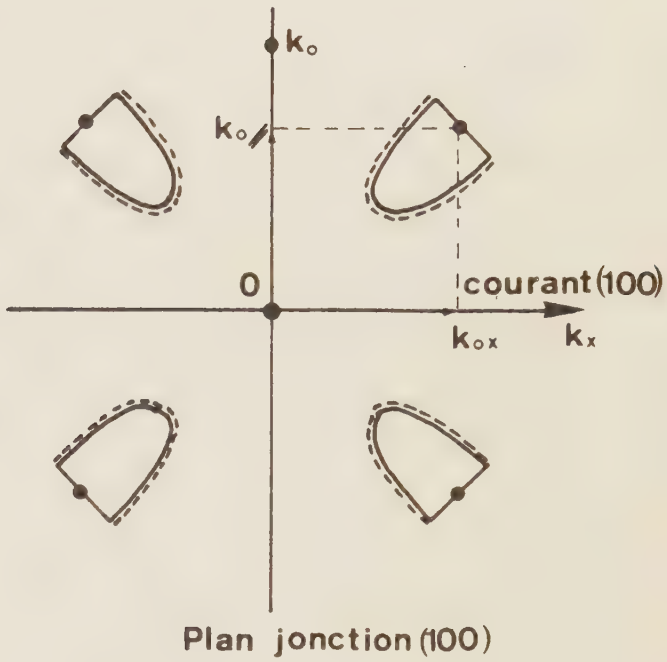
La position des vallées L du Ge et du GaSb pour différentes orientations peut être schématisée, à des rotations

.../...

autour de l'axe Ox près,de la façon suivante :



Plan jonction (110)



Plan jonction (100)

En raison de la variation de la masse dans la direction du courant en fonction de l'orientation, il est clair que dans l'orientation (110),seuls les quatre demi-ellipsoïdes centrés dans le plan de la jonction contribuent de façon importante (vallées hachurées). Dans la direction (100), en revanche, toutes les vallées sont équivalentes. Les calculs ne seront présentés de façon explicite que pour les vallées L hachurées en orientation (110). Dans les matériaux qui nous concernent, les vallées L sont centrées en bord de la zone de Brillouin,aussi parlerons-nous indifféremment de 8 demi-ellipsoïdes ou de 4 ellipsoïdes (4 vallées). Dans chaque type de vallée, m_L et m_Γ se rapportent aux masses des vallées L et Γ dans la direction du courant tunnel.

.../...

Les masses dans les directions principales des ellipsoïdes seront appelées m_l et m_t suivant la notation usuelle.

Précisons enfin que l'essentiel des approximations effectuées et les modèles choisis permettent une grande simplification des calculs mais ne diminuent en rien la généralité de notre approche. Outre les hypothèses qui ont déjà été discutées par les auteurs de ce formalisme [5], mentionnons celle qui nous est imposée par notre méconnaissance de la structure exacte du contact : l'invariance de l'interface par translation dans son propre plan. Même si nous omettons l'existence d'une différence de maille cristalline entre les deux matériaux et les défauts cristallographiques de l'interface, il n'en reste pas moins que les impuretés ionisées sont réparties dans le semiconducteur de façon aléatoire et que la distribution électronique de surface qui leur correspond n'est pas strictement uniforme. Cet effet devrait logiquement devenir important lorsque la distance moyenne r_o entre impuretés devient supérieure à l'épaisseur d de la barrière. Aux dopages qui nous préoccupent, $r_o/d < 1$, aussi l'hypothèse choisie nous semble-t-elle raisonnable à ce point de vue. Si la non-conservation de $k_{//}$ lors du transport à travers l'interface nous semble tout-à-fait plausible, il apparaît, d'après un certain nombre de calculs modèles [25], que ce phénomène n'entraîne pas de modification importante du courant tunnel.

L'ensemble de ces principes généraux et des modèles choisis est maintenant appliqué successivement à l'étude de l'influence des fluctuations de potentiel et de celle du couplage électron-phonon sur le courant tunnel.

IV - 2. Influence des fluctuations de potentiel

Nous ne nous intéressons ici qu'aux impuretés ionisées donatrices du semiconducteur car ce sont elles qui sont responsables de la formation de la barrière de potentiel. L'énergie d'ionisation des niveaux donneurs est typiquement de l'ordre de 10 meV et l'état lié qui lui correspond se trouve placé en conséquence au voisinage immédiat du bord de la bande de conduction. Nous négligeons pour l'instant l'influence du couplage électron-phonon. L'interaction des électrons avec un potentiel électrostatique est locale et instantanée. Dans les notations adoptées, la self-énergie correspondante s'écrit :

$$V_{\Sigma_{ij}} = V_{\Sigma_i} \delta_{ij}$$

où $V_{\Sigma_i}^{r,a} = V_i$ et $V_{\Sigma_i}^{+-} = 0$

V_i représente l'énergie potentielle d'un électron au site i engendrée par la distribution des impuretés ionisées et des charges de surface. Ces dernières sont supposées réparties de façon uniforme à l'interface. Leur rôle est réduit à l'imposition d'une condition aux limites sur le potentiel moyen à l'interface (x = 0). Nous écrivons le potentiel sous la forme :

$$V_i = \overline{V}_{i_x} + \delta V_i \qquad \overline{V}_{i_x} = \frac{1}{N} \sum_{i_{//}} V_i$$

où V_{i_x} est le "potentiel moyen" de la barrière. δV_i représente les fluctuations spatiales de potentiel par rapport au potentiel moyen. La transformée de Fourier partielle s'écrit :

$$V_{i_x}(q_{//}) = \sum_{i_{//}} \overline{V}_i \exp - i q_{//} i_{//}$$

$$V_{i_x}(q_{//}) = N \overline{V}_{i_x} \delta_{q_{//},0} + \delta V_{i_x}(q_{//})$$

avec $\delta V_{i_x}(0) \equiv 0$ par définition.

.../...

Ceci exprime simplement le fait que le champ électrique moyen ne peut mélanger que des états électroniques de même $k_{//}$. L'influence de ce potentiel moyen comporte plusieurs aspects. La structure de bande du semiconducteur présente une courbure au voisinage de l'interface et la barrière de potentiel qui en résulte s'oppose au libre passage des électrons. La forme de cette barrière peut être calculée exactement, en principe, en résolvant l'équation de Poisson pour une distribution homogène des impuretés ionisées et pour les conditions aux limites appropriées. Un autre aspect important est celui du mélange des états de même $k_{//}$. D'une façon générale, les électrons transmis par effet tunnel parcourent une certaine portion de la bande interdite. Lorsque le potentiel moyen n'est pas négligeable devant la largeur de bande interdite, typiquement pour $V_b > E_g/2$, les électrons ont, sur une partie de leur parcours, un caractère de valence marqué. Dans ce cas, le potentiel moyen impose l'emploi d'un modèle à plusieurs bandes. Ceci est particulièrement fréquent dans les semiconducteurs à gap direct où les extrèma des bandes de conduction et de valence se trouvent au même point de l'espace réciproque. Dans la suite, les fonctions de Green non perturbées g tiennent compte du potentiel moyen dans un modèle à une ou à deux bandes suivant le cas.

Le potentiel moyen peut encore donner lieu au mélange des états propres de la même bande mais de vallées différentes. Par exemple, dans le GaSb ou le Ge orienté en [111], le champ électrique moyen produit un léger couplage entre la vallée Γ et les vallées L centrées à $k_{//} = 0$. Bien que l'écartement de ces deux types de vallées puisse être annulé, le mélange créé par le champ électrique moyen de la zone désertée reste négligeable en raison du grand désaccord de moment (k_o) entre ces différentes vallées.

A partir de maintenant nous considérons que nous savons résoudre le problème du potentiel moyen et nous traitons en perturbation les fluctuations de potentiel δV_i. Nous omettons,

pour simplifier, d'expliciter le fait que $q_{//}$ est différent de zéro et que les indices spatiaux se rapportent à des plans parallèles à la jonction :

$$\delta V_i(q_{//}) \equiv V_i(q_{//})$$

De plus nous n'explicitons plus systématiquement l'énergie ω dans les propagateurs car la diffusion sur impuretés est élastique : l'énergie ω est conservée. Puisque les fluctuations impliquent un changement fini de $k_{//}$ ($q_{//} \neq 0$), leur effet n'apparaît automatiquement qu'au deuxième ordre.

$$\mathrm{Im}G_{aa}(k_{//},k_{//}) = N\ \mathrm{Im}g^r_{aa}(k_{//})$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{i,j} \sum_{k'_{//}} V_i(k_{//}-k'_{//})V_j(k'_{//}-k_{//})\ \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//})g^r_{ij}(k'_{//})g^r_{ja}(k_{//})] + \ldots$$

$$\equiv N\ [\mathrm{Im}g^r_{aa}(k_{//}) + \mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},k_{//})] \qquad (4.2.1)$$

Le premier terme donne lieu au courant spéculaire qui est habituellement calculé (voir 2ème partie). Nous l'exprimons une fois pour toute dans le présent formalisme :

$$\langle J_{sp}\rangle = \frac{4e}{\hbar} S \int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} |\tilde{T}(k_{//},\omega)|^2\ \mathrm{Im}g^r_{\alpha\alpha}(k_{//},\omega)\ \mathrm{Im}g^r_{aa}(k_{//},\omega)$$

$$\times [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \qquad (4.2.2.)$$

Le courant dit de "background" observé expérimentalement inclue non seulement ce courant spéculaire, mais aussi le courant engendré par les fluctuations du potentiel $\langle J_f\rangle$. Celui-ci s'obtient simplement en remplaçant, dans la formule précédente (4.2.2.), $\mathrm{Im}g^r_{aa}(k_{//})$ par $\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},k_{//})$ défini par l'expression (4.2.1). Le courant résultant s'ajoute au courant spéculaire si ces deux

.../...

quantités sont de même signe. Il s'en retranche dans le cas contraire.

Les semiconducteurs qui nous concernent sont fortement dégénérés à 0°K. Ils contiennent suffisamment d'impuretés pour que la séparation moyenne de ces dernières soit inférieure au rayon de la première orbite de Bohr : $n^{1/3} a_H > 1$. Il ne peut exister d'état lié en volume et, de façon générale, la présence de la distribution d'impuretés entraîne l'apparition d'un libre parcours moyen et la renormalisation de la densité d'états. Celle-ci se trouve peu modifiée au voisinage du niveau de Fermi, mais l'est fortement au voisinage des bords de bande par l'apparition de queues de densité d'états dans le volume du semiconducteur.
Après avoir présenté le formalisme décrivant de façon générale l'effet des impuretés au deuxième ordre pour un semiconducteur multivallée, nous nous attacherons à décrire, d'une part les diffusions intravallées et de l'autre les diffusions intervallées dans un matériau à gap indirect.

Le terme du second ordre que nous considérons est le suivant :

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},k_{//}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{k'_{//}} V_i(\vec{\Delta}_{//})\, V_j(-\vec{\Delta}_{//})\, \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//})\, g^r_{ij}(k'_{//})\, g^r_{ja}(k_{//})]$$

où $\vec{\Delta}_{//} = \vec{k}_{//} - \vec{k}'_{//}$

Il décrit le chemin suivant : propagation avec $k_{//}$ de a à i, diffusion sur le potentiel en i, propagation de i à j avec $k'_{//}$, diffusion en j et retour vers a avec le moment $k_{//}$. En raison du caractère oscillant des fonctions d'onde dans les directions parallèles à l'interface, il existe une loi de composition stricte sur le moment parallèle lors de l'interaction : $\vec{k}_{//} - \vec{k}'_{//} = \vec{\Delta}_{//}$

Définission $\varphi_{ij}(\vec{\Delta}_{//})$ par

$$\varphi_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) \equiv V_i(\vec{\Delta}_{//})V_j(-\vec{\Delta}_{//})$$

Nous avons à calculer la quantité φ_{ij} qui, à elle seule, contient toute l'information concernant la distribution des impuretés. Explicitons maintenant le caractère discret de cette distribution en rétablissant temporairement la notation spatiale complète où les indices i caractérisent le site i et non plus le plan d'abscisse i_x.

$$V_i = \sum_\nu v_\nu(\vec{R}_i - \vec{R}_\nu)$$

L'indice ν de v_ν exprime le fait général que le potentiel au site i ($\vec{R}_i$) créé par une charge située en $\vec{R}_\nu$ dépend non seulement de la distance $\vec{R}_i - \vec{R}_\nu$, mais aussi de la position de cette charge dans le cristal. Ceci est dû à la proximité des électrodes et de l'écrantage qui en résulte. Le système dans lequel sont placées les impuretés est choisi invariant par translation dans le plan parallèle à l'interface et la forme de v_ν ne dépend en réalité que de l'abscisse R_ν. Nous pouvons, à ce point, revenir aux notations simplifiées, c'est-à-dire à des indices de plan, et écrire la transformée de Fourier partielle :

$$V_i(\vec{q}_{//}) = \sum_\nu v_{i,\nu}(q_{//}) \exp - i\vec{q}_{//}.\vec{R}_{\nu//}$$

En raison de la symétrie cylindrique du problème, $v_{i,\nu}(\vec{q}_{//})$ ne dépend que du module $q_{//}$ de $\vec{q}_{//}$. Nous obtenons directement :

$$\varphi_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) = \sum_\nu v_{i,\nu}(\Delta_{//}) \sum_{\nu'} v_{j,\nu'}(\Delta_{//}) \exp - i\vec{\Delta}_{//}.(\vec{R}_{\nu//} - \vec{R}_{\nu'//})$$

que nous écrivons en séparant les termes de la façon suivante

$$\varphi_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) = F_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) + G_{ij}(\vec{\Delta}_{//})$$

où $F_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) = \sum_\nu v_{i,\nu}(\Delta_{//})\, v_{j,\nu}(\Delta_{//})$

.../...

et $G_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) = \sum_{\nu} \sum_{\nu' \neq \nu} v_{i,\nu}(\Delta_{//}) v_{j,\nu'}(\Delta_{//}) \exp -i\vec{\Delta}_{//} .(\vec{R}_{\nu_{//}} - \vec{R}_{\nu'_{//}})$

$F_{ij}(\vec{\Delta}_{//})$ décrit les processus dans lesquels les deux interactions en i et j ont lieu avec la même impureté située en $\vec{R}_{\nu}$. $G_{ij}(\vec{\Delta}_{//})$ contient les interactions sur impuretés différentes.
Nous pouvons considérer que les impuretés sont réparties de façon aléatoire dans le cristal et effectuons une moyenne statistique sur leur distribution en affectant a chaque site l de la matrice la même probabilité C d'être occupé par une impureté. C n'est autre que le rapport du nombre total N_i d'impuretés dans le volume $\mathcal{V}$ au nombre N de sites du réseau dans ce même volume, c'est-a-dire la concentration de ces impuretés.

$$F_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) = CN \sum_{l_x} v_{i_x,l_x}(\Delta_{//}) \, v_{j_x,l_x}$$

$$G_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) = C^2 N \sum_{l_x} \sum_{l'_x} v_{i_x,l_x}(\Delta_{//}) v_{j_x,l'_x}(\Delta_{//}) \sum_{l'_{//}-l_{//}} \exp - \vec{\Delta}_{//} .(\vec{l}_{//} - \vec{l}'_{//})$$

G_{ij} qui décrit les processus du deuxième ordre où les deux interactions se produisent sur des impuretés différentes est proportionnel au carré de la concentration. Pour une distribution aléatoire, nous voyons que de tels termes donnent au deuxième ordre une contribution nulle. Il apparaît en effet une interférence destructive entre les diffusions prenant place sur différentes impuretés.

$$\sum_{l'_{//}-l_{//}} \exp -i\vec{\Delta}_{//} .(\vec{l}_{//} - \vec{l}'_{//}) = \frac{4}{\varepsilon^2} \frac{\sin \Delta_{//} y \, \frac{l}{2} \sin \Delta_{//} z \frac{l}{2}}{\Delta_{//} y \quad \Delta_{//} z} \sim N\delta_{\Delta_{//}},$$

Seul un transfert de moment nul demeure qui, par définition, se trouve déja pris en compte par le potentiel moyen.

$G_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) \equiv 0$ au second ordre et nous avons alors :

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},k_{//}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{k'_{//}} F_{ij}(\vec{\Delta}_{//}) \, \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//}) g^r_{ij}(k_{//}) g^r_{ja}(k_{//})] \qquad (4.2.4.)$$

où $F_{ij}(\vec{\Delta}_{//})$ est donné par (4.2.3)

Cette expression traduit, à l'ordre le plus bas, l'influence sur le courant tunnel des fluctuations de potentiel. Le phénomène physique correspond à la diffusion élastique des électrons par les impuretés et, au second ordre, l'effet est indépendant du signe de la charge portée par l'ion diffuseur.

Le courant induit par les impuretés est obtenu directement par une formule du type (4.2.2.) où Img^r_{aa} est remplacé par $Im\delta g^r_{aa}$. La discussion présentée dans l'introduction nous permet de séparer les différents termes en contributions intravallées et en contributions intervallées. Rappelons que ces effets correspondent à des changements de vecteur d'onde de l'ordre de $10^6 cm^{-1}$ et $10^8 cm^{-1}$ ($\sim k_o$), respectivement, pour les cas qui nous concernent.

IV - 2. 1. Processus intravallées

En d'autres termes, nous considérons ici l'effet des impuretés à l'intérieur d'une vallée particulière. La question posée est donc de déterminer l'importance du courant dû aux impuretés et éventuellement les conditions dans lesquelles le calcul spéculaire peut rendre compte de façon satisfaisante des résultats expérimentaux. Voyons maintenant comment le potentiel des impuretés peut être estimé dans les diverses régions du semiconducteur.

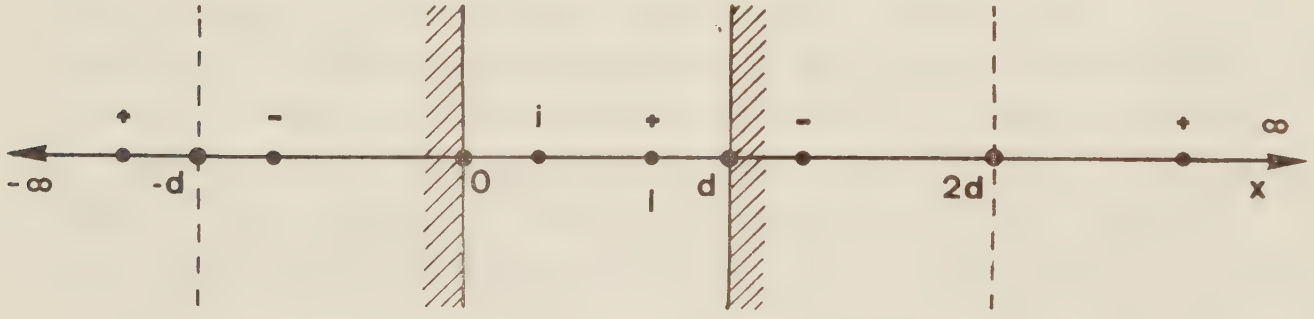
Dans l'électrode, tout d'abord, c'est-à-dire pour $x > d$, les porteurs libres écrantent le champ électrique créé par les charges. Nous prenons un potentiel coulombien dont l'écrantage est caractérisé par k_s, constante d'écran dans le volume du matériau : $k_s \equiv (6\pi ne^2/\mu_F)^{1/2}$.
$v_{i,l}(\Delta_{//})$ s'obtient directement en effectuant la transformation de Fourier inverse de $v(\vec{q})$ par rapport à q_x. $v_{i,l}(\Delta_{//})$ ne dépend que de $x_i - x_l$.

.../...

$$v_{i,l}(\Delta_{//}) = \frac{\pi A}{(\Delta_{//}^2 + k_s^2)^{1/2}} \exp -(\Delta_{//}^2 + k_s^2)^{1/2} |x_i - x_l| \qquad x_l > d$$

où $A = \frac{2e^2}{\varepsilon_s}$ et $\Delta_{//} = |\vec{\Delta}_{//}|$

Le calcul du potentiel créé par une impureté située dans la barrière est moins trivial. Dans cette région, en effet, le potentiel dépend séparément de x_i et x_l en raison de la proximité des électrodes. Si nous assimilons le système a celui d'une charge placée entre deux plaques conductrices infinies, nous sommes ramenés à une problème d'électrostatique. Le potentiel $v_{i,l}(\Delta_{//})$ est constitué de la superposition de celui de la charge isolée en x_l et de ceux de l'infinité des charges images correspondantes.



Le potentiel $v_{i,l}(\Delta_{//})$ est évidemment nul pour $x_i = 0$ ou d, ainsi

$$F_{ij}(\Delta_{//}) = 0 \quad \text{si i ou j} = 0 \text{ ou d .}$$

$v(\vec{q})$ représente approximativement la moyenne du potentiel $v_{i,l}$ dans une sphère de rayon $\sim \frac{1}{q}$ autour de l'impureté. Lorsque $\vec{q} \gg \frac{1}{d}$, et si l'impureté considérée n'est pas située trop près de l'une ou l'autre des électrodes, nous pouvons estimer le potentiel $v_{i,l}(\Delta_{//})$ en ne considérant que la charge elle-même et ses images directes dans les deux électrodes. En d'autres termes, nous négligeons les interférences entre les images.

$F_{ij}(\Delta_{//})$, qui s'annule lorsque i ou j tend vers 0 ou d, tend vers une valeur maximale quand i et j sont voisins de d/2, le milieu de la barrière. Qualitativement, nous pouvons dire que c'est au point milieu d/2 que l'électron subit au maximum l'influence des impuretés qui se trouvent dans son voisinage $|d/2 - x_1| < \frac{1}{\Delta_{//}} \ll d$. Les charges images sont séparées de ce point milieu par une distance supérieure à $d/2 > \frac{1}{\Delta_{//}}$.
Le calcul effectué avec deux charges images nous conduit à l'expression :

$$F_{max}(\Delta) \equiv F_{d/2,d/2}(\Delta) =$$

$$\frac{\pi^2 A^2}{\Delta^2} \times \frac{1}{\Delta} \left[1 - 2\Delta d e^{-\Delta d}(1-e^{-\Delta d}) - 2e^{-\Delta d}(1-e^{-\Delta d} + \frac{1}{2}e^{-2\Delta d}) \right]$$

Nous avons omis l'indexation $_{//}$ de Δ.

Lorsque $\Delta_{//}$ devient très grand devant 1/d

$$F^{\infty}_{max}(\vec{\Delta}_{//}) \rightarrow \frac{\pi^2 A^2}{\Delta_{//}^2} \times \frac{1}{\Delta_{//}}$$

qui n'est autre que le carré de la composante de Fourier $v_{i,1}(\Delta_{//})$ pour $x_i = x_1$, multiplié par la portée $1/\Delta_{//}$ à laquelle la diffusion est efficace. Les deux derniers termes de $F_{max}(\Delta_{//})$ décrivent l'affaiblissement de F dû à la présence des deux charges images. Lorsque $\Delta_{//}$ décroît, $F_{max}(\Delta_{//})$ est affaibli par rapport à $F^{\infty}_{max}(\Delta_{//})$. Pour $\Delta_{//} = 2/d$, par exemple, nous obtenons :

$$F_{max}(2/d) \sim 0.2\ F^{\infty}_{max}(2/d)$$

N'étant concernés ici que par les ordres de grandeur, nous négligeons les variations spatiales de F_{ij} que nous remplaçons par la forme asymptotique $\overline{F} \equiv F^{\infty}_{max}$. Cette forme surestime nettement la valeur réelle F_{ij} dès que $\Delta_{//} \lesssim 2/d$.

.../...

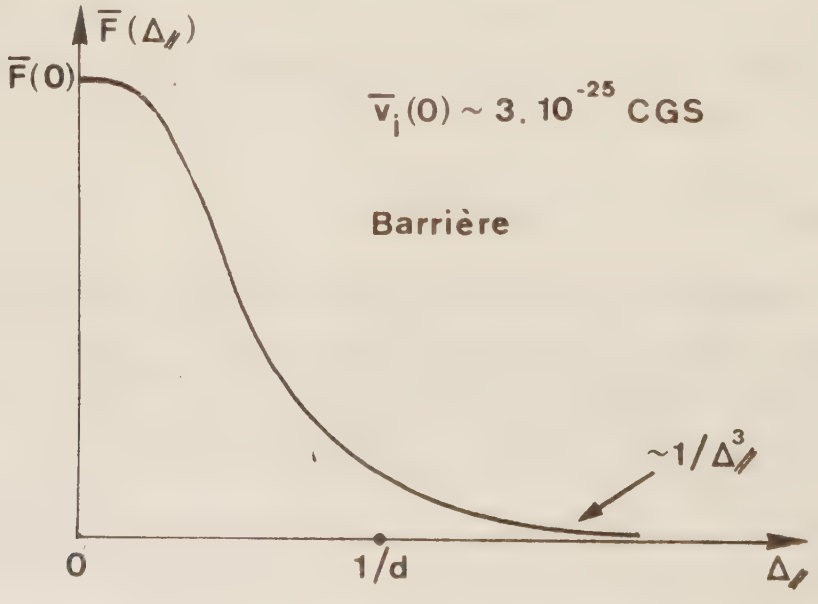
En revanche, lorsque $\Delta_{//}$ tend vers zéro, un nombre d'images de plus en plus grand doit être pris en compte. Le calcul exact du problème d'électrostatique correspondant montre que lorsque $i_{//} - l_{//}$ tend vers l'infini, $v_{i,l}$ décroît exponentiellement. Cette forme asymptotique nous assure que $v_{i,l}(\Delta_{//})$ tend vers une valeur finie lorsque $\Delta_{//}$ tend vers zéro. Cette limite est, en fait, directement reliée à la force du potentiel moyen et nous pouvons ainsi l'obtenir de façon commode. Bien que la valeur $\Delta_{//} = 0$ soit strictement interdite, nous pouvons écrire :

$$\lim_{\Delta_{//} \to 0} V_i(\Delta_{//}) = N\overline{V}_{i_x} = CN \sum_l v_{i,l}(0)$$

La valeur moyenne $\overline{v}_i(0)$ de $v_{i,l}(0)$ dans la barrière est approximativement :

$$\overline{v}_i(0) \cong \lim_{\Delta_{//} \to 0} v_{i,l}(\Delta_{//}) \sim \varepsilon \frac{\overline{V}_{i_x}}{cd}$$

Dans la représentation continue, cette quantité s'exprime par $\frac{\overline{V}(x)}{nSd}$ qui n'est autre que le potentiel moyen de barrière divisé par le nombre total d'impuretés qui s'y trouvent. Nous avons accès expérimentalement à cette quantité et pouvons alors estimer les variations de $\overline{F}(\Delta_{//})$ avec Δ à l'intérieur de la barrière.



Pour les paramètres habituels nous obtenons :

$$\bar{F}(0) \;/\; \bar{F}(1/d) \gtrsim 10$$

L'effet prépondérant provient des transferts de moment $\Delta_{//}$ inférieurs à $\sim 1/d$.

Nous comparons directement à la conductance spéculaire celle qui est engendrée par les fluctuations $\langle G_f \rangle$. A l'intérieur d'une même vallée, les $k_{//}$ impliqués sont faibles à l'échelle de la zone de Brillouin et nous négligeons les variations avec $k_{//}$ de l'élément de matrice de transfert $\tilde{T}$ et de la densité d'états du métal $\mathrm{Img}^{r}_{\alpha\alpha}(k_{//},\omega)$. Dans la représentation continue nous avons alors :

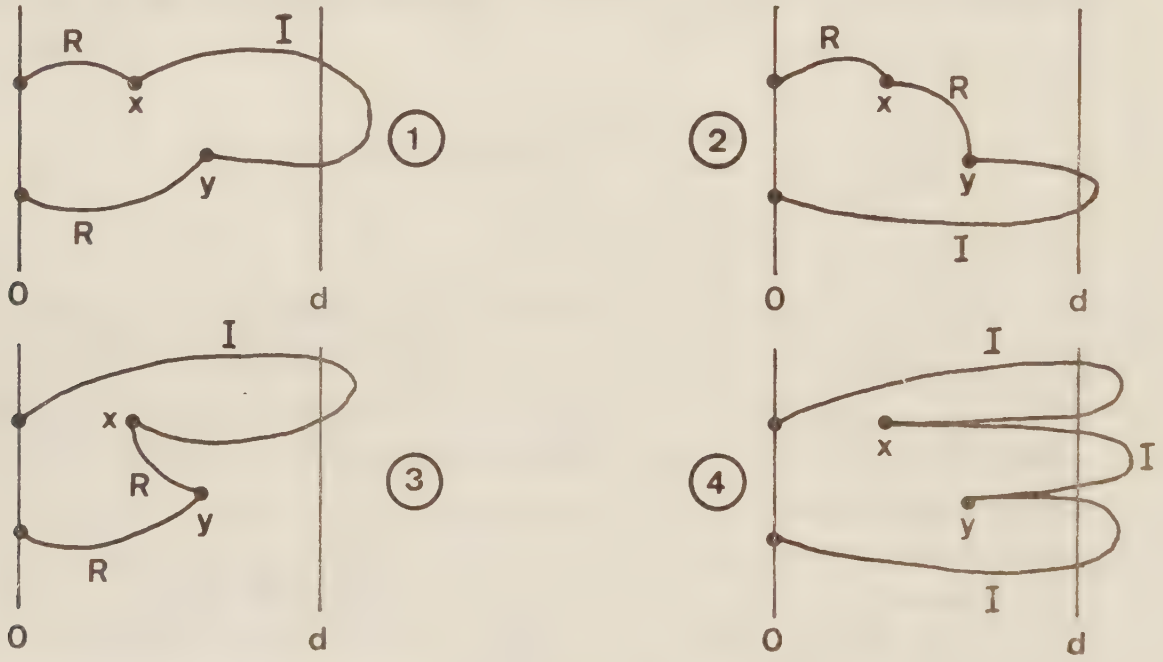
$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} \sim \frac{\mathrm{Im}\delta g^{r''}(0,0,k_{//},k_{//})}{\mathrm{Im}g^{r''}(0,0,k_{//})}$$

$1/2\ \mathrm{Im}\delta g^{r''}$ est la limite continue de $\mathrm{Im}\delta g^{r}_{aa}(k_{//},k_{//})$ donnée par l'expression (4.2.4) et $1/2\ \mathrm{Im}g^{r''}(0,0,k_{//})$ est celle de $\mathrm{Im}g^{r}_{aa}(k_{//})$. La forme et la force du potentiel des fluctuations ayant été estimées, nous sommes maintenant en mesure de déterminer approximativement l'amplitude et le signe de l'effet des impuretés sur la conductance. Nous possédons un certain nombre d'informations sur l'influence des impuretés situées dans le volume de l'électrode. Aux dopages considérés, celles-ci provoquent une modification de la densité d'états qui apparaît essentiellement aux énergies voisines du bas de la bande de conduction. La densité d'états au niveau de Fermi est peu perturbée. Si ces phénomènes de volume sont empiriquement assez bien connus, leur influence sur la conductance tunnel n'est pas évidente à priori. Si celle-ci peut être, en principe, déterminée de façon précise, il apparaît que la forme oscillatoire des fonctions de Green dans cette région implique un recours constant à l'odinateur.

.../...

Nous nous contenterons ici de l'étude des diffusions qui prennent place dans la barrière, région dans laquelle nous pouvons nous attendre à des effets importants en raison de l'inefficacité de l'écrantage.

Les estimations effectuées précédemment nous indiquent que $\overline{F}(\Delta_{//})$ pour $x < d$ est environ 10 fois plus grand à $\Delta_{//} = 0$ qu'à $\Delta_{//} \sim 1/d$. Pour les transferts de moment très supérieurs à cette valeur, $\overline{F}(\Delta_{//})$ décroît typiquement comme $1/\Delta_{//}^3$. Voyons maintenant quelle est l'influence de la transmission à travers la barrière, c'est-à-dire celle de $\mathrm{Im}[g^{r'}(0,x)g^{r}(x,y)g^{r'}(y,0)]$. Pour x et y donnés, ce facteur comprend quatre termes qu'il est instructif d'illuster par les chemins suivants :



I et R correspondent respectivement à la partie imaginaire et à la partie réelle de la fonction de Green entre les deux points considérés. Il est clair qualitativement que les parcours des deux premiers schémas sont analogues au parcours direct n'impliquant pas d'interaction. Les facteurs d'évanescence exponentielle qui leur sont associés sont très voisins tant que $k_{//}$ et $k'_{//}$ sont faibles. Le troisième type de chemin nécessite par contre un retour en arrière qui devient évidemment prohibitif dès que i

et j sont séparés par une distance supérieure à la distance d'évanescence dans la barrière $1/K \lesssim d/10$ environ. A fortiori, le quatrième ne peut contribuer que si x et y sont situés au voisinage immédiat de $x = d$. Nous pouvons négliger les contributions des deux derniers diagrammes. Les deux premiers sont du même ordre de grandeur et nous avons ainsi :

$$\mathrm{Im}[g^{r'}(0,x)g^{r}(x,y)g^{r'}(y,0)] \sim 2\mathrm{Re}g^{r'}(0,x)\mathrm{Im}g^{r}(x,y)\mathrm{Re}g^{r'}(y,0)$$

Les formules présentées en Appendice A nous montrent que cette quantité s'exprime aisément en fonction de $\mathrm{Im}g^{r''}(0,0)$ et peut s'écrire symboliquement sous la forme

$$\mathrm{Im}[g'gg'] \sim 2 \times \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{8} \frac{\exp-\left[\int_x^a (K'-K)du + \int_y^a (K'-K)du\right]}{[K(x)K'(x)K(y)K'(y)]^{1/2}} \mathrm{Im}g''$$

dans laquelle nous référons par K et K' respectivement à la propagation de 0 à x et de y à 0 avec $k_{//}$ d'une part, et à celle de x à y avec $k'_{//}$ de l'autre.
Nous voyons que $\langle G_f \rangle$ et $\langle G_{sp} \rangle$ sont de même signe : à l'ordre le plus bas, la diffusion sur les impuretés de la barrière produit une conductance qui s'ajoute à la conductance spéculaire et ceci quel que soit le signe du potentiel. De la même façon que l'exponentielle de transmission impose une coupure exponentielle sur les $k_{//}$ et restreint le domaine utile à $k_{//} \lesssim k_c$, le facteur exponentiel de l'expression précédente limite le domaine utile de $k'_{//}$ à $k'_{//} \lesssim k_c$. La valeur de k_c est donnée dans une barrière de Schottky par

$$k_c \sim \left[\frac{2m}{\hbar^2} E_0\right]^{1/2} \sim 3/d.$$

Ce présent raisonnement joint à la forme de $\overline{F}(\Delta_{//})$ assure que les transferts de vecteur d'onde $\Delta_{//}$ supérieurs à $1/d$ contribuent de façon négligeable.

.../...

L'importance des fluctuations est estimée en négligeant les variations en $k'_{//}$ de $Im[g'gg']$ devant celles de $\bar{F}(\Delta_{//})$.

$$Im[g'gg'] \sim \frac{1}{4} \left(\frac{K}{V_b}\right)^2 Img''$$

et d'après la forme de $\bar{F}(\Delta_{//})$, nous avons approximativement :

$$\int d^2k'_{//} \quad \bar{F}(\Delta_{//}) \sim \pi \times \left(\frac{1}{2d}\right)^2 \bar{F}(0)$$

soit enfin

$$\frac{\langle G_f \rangle_b}{\langle G_{sp} \rangle} \sim 2 \frac{1}{(2\pi)^2} \pi \left(\frac{1}{2d}\right)^2 \bar{F}(0) \, d^2 \, \frac{1}{4} \left(\frac{K}{V_b}\right)^2$$

$$\frac{\langle G_f \rangle_b}{\langle G_{sp} \rangle} \sim 10^{-2} \frac{K^2}{nd}$$

Pour $K \sim 10^7 cm^{-1}$, $n \sim 5 \times 10^{18} cm^{-3}$, $d \sim 100$ Å ,

$$\frac{\langle G_f \rangle_b}{\langle G_{sp} \rangle} = 0.2$$

La conductance due aux impuretés est donc quelque peu inférieure à la conductance spéculaire. Ceci explique que, dans de nombreux cas, la conductance observée soit en accord quantitatif avec le calcul spéculaire.

Nous présentons dans le tableau VI les paramètres utiles des contacts M.S. que nous étudions, et résumons dans le tableau VII nos résultats essentiels.

matériau	vallée	m^*/m_o	ε_S	V_b(eV)
GaAs	Γ	7×10^{-2}	12.5	1
Ge	L	1.2×10^{-1}	16	0.63
GaSb	Γ	5×10^{-2}	16	0.66
GaSb	L	10^{-1}	"	0.85

Tableau VI

matériau	n $\times 10^{18} cm^{-3}$	dopant	$\langle G \rangle / \langle G_{sp} \rangle$ exp.	$\langle G_f \rangle / \langle G_{sp} \rangle$ calc.
GaAs (Γ)	5.4	Te	2	0.3
Ge (L)	6.7	Sb	1	0.2
"	5.1	As	10	0.3
"	9.8	As	1	0.2
GaSb (Γ)	3.5	Te	1	0.1
GaSb (L)	3.8	Te	75	0.3

Tableau VII

Notre calcul modèle permet une étude relative des diverses situations expérimentales. La comparaison entre les valeurs calculées pour le germanium dopé à l'arsenic et à l'antimoine montre que les différences de paramètres sont trop faibles pour expliquer l'écart observé. Ceci est encore plus clair dans le cas du GaSb. L'expérience montre que les valeurs calculées en configuration directe (Γ) sont raisonnables et le calcul indique que le passage en configuration indirecte n'apporte, dans ces conditions, qu'un renforcement de $\langle G_f \rangle_b / \langle G_{sp} \rangle$ tout-à-fait insuffisant pour permettre d'interpréter nos observations par de tels mécanismes. Quelques remarques s'imposent concernant l'influence du type d'impureté dans un matériau donné, le germanium plus paticulierement.

.../...

Nous avons vu plus haut que les diffusions qui contribuent le plus n'apportent qu'un faible transfert de vecteur d'onde $\Delta_{//} \lesssim 1/d$. En d'autres termes, les électrons qui participent à ces processus ne ressentent que le potentiel des impuretés moyenné sur une sphère dont le rayon est de l'ordre de $d \sim 100$ Å. Cette valeur est proche du rayon de Bohr a_H qui caractérise l'état fondamental de l'électron lié à l'impureté. L'expérience montre que l'énergie d'ionisation E_i qui lui correspond ne dépend que faiblement de la nature de l'impureté. L'ordre de grandeur de cette dépendance peut être estimé approximativement en se rapportant a la théorie de la masse efficace [26] et en effectuant la correction suivante :

$$v_{réel} / v_{coulomb} \sim (E_i / E_{calc.})^{1/2}$$

pour $\Delta_{//} \sim \frac{1}{d}$

$E_{calc.}$ représente l'énergie d'ionisation calculée dans cette théorie. Cette correction n'entraîne au maximum qu'une augmentation de 20 % du potentiel de l'arsenic par rapport à celui de l'antimoine. Nous sommes donc assurés que, pour les faibles transferts de moment qui interviennent dans les processus intravallées, le type de l'impureté ne joue aucun rôle notable, à fortiori lorsque $\Delta_{//} \to 0$. Au contraire, aux très grands transferts de moment impliqués dans les transitions intervallées, les électrons viennent sonder le coeur du potentiel des impuretés et, en conséquence, la nature de celles-ci apparaît de façon cruciale.

Dans un contact M.S., on peut concevoir l'apparition d'une résonance entraînée par le passage de l'électron par l'énergie de l'état lié du niveau donneur. Ces niveaux d'énergie sont situés typiquement à 10 meV sous la bande de conduction. La région critique se trouve donc située au voisinage immédiat du point tournant et l'on peut raisonnablement estimer que leur présence se traduit par une réduction de la largeur effective de la barrière qui ne dépasse pas E_i / V_b, soit quelques pourcent typiquement. Cet effet est trop faible pour entraîner une modification notable de la conductance.

Terminons ce chapitre concernant les diffusions intravallées sur impuretés en commentant nos principaux résultats. Le terme d'ordre le plus bas implique deux interactions avec la même impureté. La conductance qui lui correspond s'ajoute à la conductance spéculaire et lui est généralement inférieure. Les diffusions qui interviennent de façon prépondérante sont celles qui donnent lieu à un transfert de vecteur d'onde $\Delta_{//}$ inférieur à $1/d$ environ : les chemins passant près des impuretés ne sont pas particulièrement favorisés et les électrons ne ressentent que le potentiel des impuretés moyenné sur une distance qui est de l'ordre de l'épaisseur de la barrière au moins. Cette distance est typiquement l'extension dans le plan de la jonction des paquets d'onde que l'on pourrait, en quelque sorte, associer aux électrons dans la barrière.

Les conductances s'ajoutent et tout se passe comme si l'existence des fluctuations créait de nouvelles possibilités de transfert d'un coté a l'autre de la jonction. En particulier, les diffusions permettent de s'affranchir de la contrainte imposée par le domaine de l'espace réciproque disponible dans l'électrode semiconductrice et par là d'engendrer de nouveaux chemins tunnel. Comme nous l'avons vu cependant, $\Delta_{//} \lesssim 1/d < k_F$ en général, si bien que la levée de cette contrainte ne représente qu'un aspect négligeable de l'effet des fluctuations intravallées.

Enfin, l'amplitude de $\langle G_f \rangle_b / \langle G_{sp} \rangle$ apparaît peu dépendante des paramètres des jonctions dans les limites usuelles et, en particulier, n'est pas influencée de façon mesurable par la nature de l'impureté utilisée. En conséquence, les écarts importants observés sur le germanium et le GaSb ne peuvent être attribués à ce type de processus.

IV - 2.2. - Processus intervallées

Dans le cas d'un semiconducteur à bande de conduction multivallée, nous devons envisager les transitions intervallées. Pour fixer les idées, nous considérons le cas particulier du n-Ge et du n-GaSb dans lequel nous avons fait varier de façon quasi-continue l'écartement entre la vallée Γ et les vallées L en appliquant une pression hydrostatique. Ce type particulier de transition intervallée implique un changement de vecteur d'onde extrêmement grand $k_o \sim 10^8$ cm^{-1} puisque les vallées L sont situées en bord de zone. Nous voulons ici estimer le courant qui résulte de tels processus et préciser les situations dans lesquelles il peut éventuellement être observé. Nous utilisons, pour simplifier, le modèle de bande présenté en introduction qui correspond à l'orientation (110) et n'explicitons que le calcul correspondant aux vallées L centrées dans le plan parallèle à la jonction. Lorsque le gap est indirect, la contribution spéculaire des autres vallées L est tout-à-fait négligeable en raison de la plus forte valeur de la masse effective dans la direction x du courant tunnel. Dans ce modèle nous avons $\Delta_{//} \sim k_o$ à quelques pourcent près.

Nous traitons les fluctuations intervallées en perturbation au deuxième ordre. Nous devons en principe tenir compte dans chaque vallée de la renormalisation due aux fluctuations intravallées Si les processus intravallées n'entraînent qu'un courant négligeable devant le courant spéculaire, nous pouvons dans ce cas les négliger de façon légitime. Les résultats précédents montrent que ceci n'est pas toujours le cas. Pour calculer les termes intervallées à l'ordre le plus bas, il faudrait alors utiliser comme fonctions de Green non perturbées, les fonctions de Green renormalisées dans chaque vallée par les diffusions intravallées sur impuretés. Dans la pratique, cependant, nous sommes essentiellement intéressés à déterminer l'amplitude des phénomènes. L'expérience aussi bien que le calcul nous montrent qu'il existe de nombreuses situations dans lesquelles le courant dû aux fluctuations intravallées est du même ordre de grandeur que le courant spéculaire et possède une structure similaire. Dans cette optique, il nous semble raisonnable d'estimer

.../...

les contributions intervallées au courant total en utilisant dans chaque vallée les fonctions de Green non perturbées par les fluctuations.

Nous reprenons alors la formule (4.2.2) qui exprime, à l'ordre le plus bas, l'effet des fluctuations et est valable dans tout le volume du semiconducteur hormis les quelques premières couches atomiques situées au voisinage de l'interface. Les deux interactions en i et j s'effectuent toutes les deux sur une même impureté située en l. En raison du très grand transfert de vecteur d'onde k_o imposé par la séparation des vallées, il est physiquement clair que les électrons impliqués dans la transition viennent interagir avec l'impureté à une distance de l'ordre de $1/k_o \sim 1$ Å. A si courte distance, l'écrantage créé par les porteurs libres des deux électrodes est parfaitement inéfficace et le potentiel de diffusion devient indépendant de la position spatiale de l'impureté. Pour une impureté coulombienne nous avons par exemple :

$$v_{l,i}(\Delta_{//}) \sim \frac{1}{\Delta_{//}} \exp - \Delta_{//} |i - l|$$

Le transfert de moment $\Delta_{//}$ est pratiquement égal à k_o car le "coefficient de transmission " n'autorise, encore une fois, que de faibles écarts de l'ordre de $k_c \sim 2.10^6$ cm^{-1} autour de la valeur moyenne la plus favorable k_o. Nous voyons donc apparaître le caractère quasi-local de l'interaction et, en excellente approximation, nous prenons i = j = l et la composante de Fourier totale $v(k_o)$. L'expression s'écrit donc de façon simplifiée :

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//}, k_{//}) = \frac{C}{N} v^2(k_o) \sum_i \sum_{k'_{//}} \mathrm{Im}\{[g^r_{ai}(k_{//})]^2 g^r_{ii}(k'_{//})\} \quad (4.2.5)$$

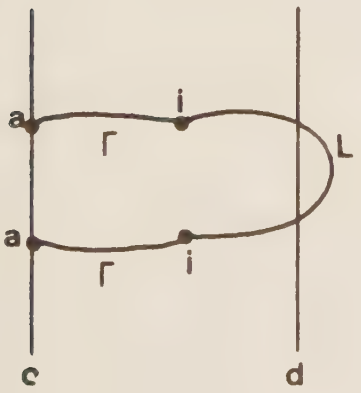
Rappelons qu'ici $k_{//}$ et $k'_{//}$ se rapportent à deux vallées différentes. Bien que nous puissions estimer ces termes pour une configuration quelconque des bandes du matériau, nous nous attachons particulièrement à la configuration suivante : les vallées L (masse élevée) sont situées à énergie plus basse que la vallée Γ (masse légère).

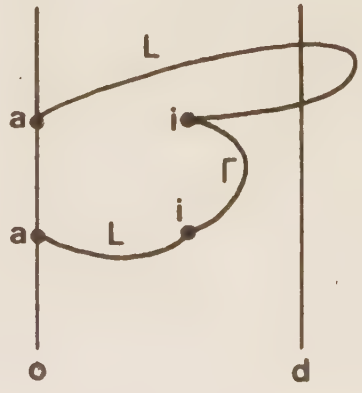
.../...

Nous considérons que l'écart entre ces vallées est tel qu'aucun état électronique de la vallée Γ ne se trouve rempli à 0°K ($E_\Gamma - E_L > \mu_F$). La configuration de bande et la barrière M.S. correspondantes sont schématisées sur la figure 10 (d) et représentent le cas du n-Ge à pression ambiante ainsi que celui du n-GaSb à $P > P_1$. Dans ce cas particulier, et tant que $V > \mu_F - (E_\Gamma - E_L)$, seules les vallées L contribuent au courant spéculaire. A polarisation inférieure, la vallée Γ participe à ce courant et sa contribution devient prépondérante car, dans les cas qui nous intéressent, la masse m_Γ est suffisamment faible devant m_L pour compenser les différences de hauteur et de largeur de barrière relatives à ces deux types de vallée. Pour le moment, nous écartons cet effet classique en nous plaçant à $V \sim 0 > \mu_F - (E_\Gamma - E_L)$. L'énergie ω qui entre dans l'expression de $\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//}, k_{//}, \omega)$ est alors toujours inférieure à E_Γ. Les fonctions de Green non perturbées relatives à la vallée Γ sont donc purement réelles et la relation précédente s'écrit :

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//}, k_{//}) = \frac{3}{N} v^2(k_o) \sum_i \sum_{k'_{//}} \{[g^r_{ai}(k_{//}\{\Gamma\})]^2 \times \mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{//}\{L\}) + \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//}\{L\})]^2 \times g^r_{ii}(k'_{//}\{\Gamma\})\}$$

Les diagrammes correspondants mettent clairement en évidence la signification physique de ces deux termes :





Le premier chemin implique une transmission s'effectuant, partiellement au moins, dans la vallée Γ. Puisque $m_\Gamma < m_L$, la transmission de a à i s'effectue beaucoup plus facilement dans la vallée Γ que dans la vallée L. Plus le point i se rapproche de l'extrémité de la zone déserte , plus le parcours Γ est long et le parcours L minimisé. Le deuxième diagramme montre qu'en revanche le dernier terme donne lieu à une transmission qui s'effectue essentiellement dans la vallée L quelle que soit la position de l'impureté. Le rapport des coefficients de transmission est supérieur à 10^3 en faveur de la vallée Γ, aussi pouvons-nous négliger la contribution du dernier terme. Le processus intervallée prépondérant consiste en la traversée d'une partie importante de la barrière dans la vallée Γ et la diffusion vers les vallées L qui comportent une densité d'états finie à l'énergie considérée. Le courant résultant s'ajoute au courant spéculaire car la densité d'états est positive et

$$\sum_{k'_{//}} \mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{//}, \{L\}) = -\frac{1}{\pi} \rho_i^{(L)}(\omega)$$

est du même signe que $\mathrm{Im} g^r_{aa}(k_{//})$. Il est clair que, dans la configuration particulière choisie, les diffusions créent de nouveaux chemins et l'on peut sans ambiguité considérer le courant résultant comme étant "assisté" par les impuretés au sens habituellement employé en effet tunnel.

Il est possible de déterminer qualitativement la région du semiconducteur qui fournit l'essentiel du courant assisté par les impuretés. Le potentiel de diffusion étant indépendant de la position, il suffit pour cela de considérer la forme des fonctions de Green qui interviennent dans l'expression suivante :

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//}, k_{//}) = \frac{C}{N} v^2(k_o) \sum_i [g^r_{ai}(k_{//}, \{\Gamma\})]^2 \sum_{k'_{//}} \mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{//}, \{L\}) \qquad (4.2.6)$$

A l'énergie considérée, la fonction de Green de la vallée Γ décroît de façon approximativement exponentielle depuis l'interface (Appendice A). La rapidité de l'évanescence est déterminée

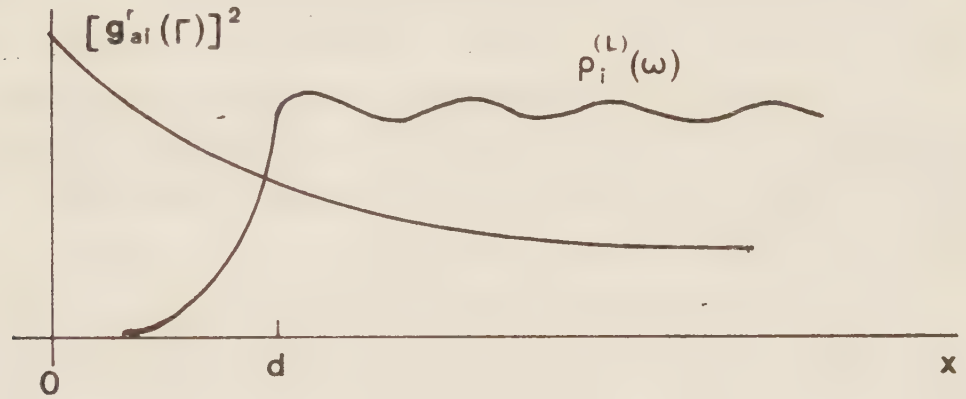
.../...

par la valeur locale du vecteur d'onde imaginaire de l'électron dans la direction x($K_\Gamma \sim 10^7 cm^{-1}$). Au delà de la zone désertée (x > d), le taux d'évanescence est constant et prend la forme suivante :

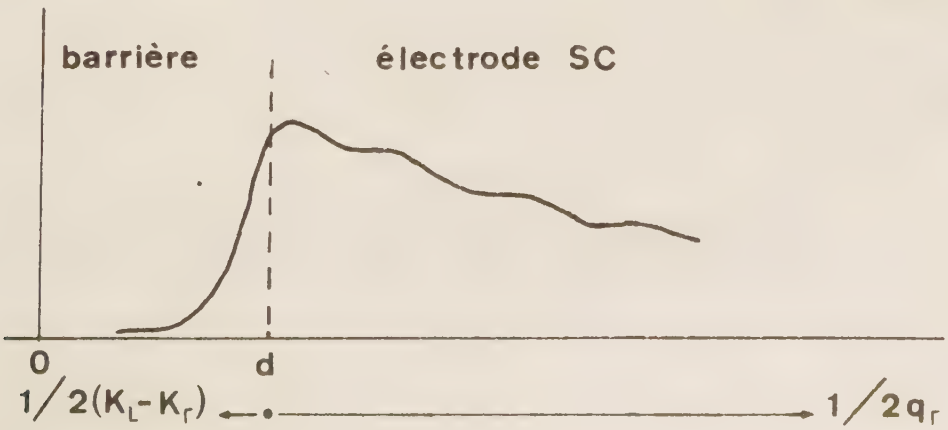
$$q = \left(\frac{2m_\Gamma}{\hbar^2} [\Delta E - \omega + \varepsilon_{//}] \right)^{1/2}$$

q est de l'ordre de quelques 10^6 cm^{-1}. ΔE est défini comme $E_\Gamma - E_L$ et $\varepsilon_{//} = \frac{h^2 k_{//}^2}{2m_\Gamma}$.

En revanche, la densité d'états $\rho_i^{(L)}(\omega)$ d'une vallée L est pratiquement constante pour x > d et décroît exponentiellement à l'intérieur de la barrière pour x < d. L'évanescence est imposée dans cette région par $K_L > K_\Gamma$. Les schémas suivants illustrent les variations spatiales de ces grandeurs.



Le produit de ces deux quantités, lorsque $K_L > K_\Gamma$, a la forme suivante :



La région qui contribue le plus est essentiellement constituée du voisinage immédiat de l'extrémité de la zone déserte et s'étend typiquement à une distance $\sim \frac{1}{2(K_L - K_\Gamma)}$ dans la barrière et $\sim 1/2q_\Gamma$ dans l'électrode. L'importance respective de ces deux domaines dépend principalement de m_Γ/m_L et de $\Delta E/V_b$. Si $\Delta E \ll V_b$, les fonctions de Green de la vallée Γ s'étendent profondément dans le semiconducteur et les impuretés situées dans un volume important "assistent" l'effet tunnel. Si nous comparons ces résultats à ceux du chapitre précédent, nous voyons apparaître une différence majeure. Alors que les processus intervallées impliquent une composante de Fourier du potentiel plus faible d'un facteur de l'ordre de $1/k_o^2 d^2$, ils bénéficient par contre d'une amplification g qui n'est autre que le rapport des coefficients de transmission dans les deux vallées et peut atteindre 5.10^4 dans le cas du n-GaSb. Les termes d'ordre supérieur en diffusion intervallée peuvent être estimés de façon analogue. Seuls les termes d'ordre pair interviennent qui, à l'ordre le plus bas en concentration, correspondent à une diffusion multiple sur la même impureté. Sans entrer dans le détail, nous pouvons assurer que leur contribution au courant tunnel sera négligeable devant celle du deuxième ordre. En effet, le maximum "d'amplification" sur la transmission est obtenu dès l'ordre 2 et l'on peut vérifier que

$$< G_f^{(2n)} > / < G_f^{(2n-2)} > \lesssim 10^{-4}$$

Le traitement à l'ordre le plus bas est ainsi justifié.
Il est bien sûr possible d'obtenir à la fois des diffusions intervallées et des diffusions intravallées. Ce sont ces derniers processus que nous avons négligés plus haut en nous appuyant sur les données expérimentales. Nous sommes maintenant en mesure d'effectuer le calcul numérique de ces effets. Nous avons vu que le rapport de la contribution du volume de l'électrode à celle de la barrière est

$$\frac{< G_f >_{\text{volume}}}{< G_f >_{\text{barrière}}} \sim \left(\frac{V_b}{\Delta E - \omega} \right)^{1/2} \left[\sqrt{\frac{m_L}{m_\Gamma}} - \sqrt{1 + \frac{\Delta E}{V_b}} \right]$$

.../...

comme le montre un calcul plus précis. Dans le cas du n-Ge ce rapport est de l'ordre de 2 (ΔE = 150 meV) et pour le n-GaSb à haute pression il est supérieur ou égal à 6($0 \lesssim \Delta E \lesssim 25$ meV). Il nous suffit d'estimer la conductance due aux impuretés situées au-delà de la zone déserte ($x > d$). Dans cette région les fonctions de Green sont simples et seule reste à estimer la force du potentiel. La forme du potentiel à très courte distance ($r \sim 1/k_o$) n'est pas connue et nous utilisons tout d'abord un potentiel coulombien non écranté ($k_o \gg k_s$) c'est-a-dire :

$$v_o(k_o) = \frac{1}{\upsilon} \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_S k_o^2}$$

La conductance engendrée par les fluctuations intervallées s'exprime à l'aide de la formule(4.2.2)par

$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} = \frac{\sum_L \int^{(\Gamma)} d^2k_{//} \left|\tilde{T}\ (k_{//}\{\Gamma\})\right|^2 \mathrm{Im} g^r_{\alpha\alpha}(k_{//}\{\Gamma\})\ \mathrm{Im}\delta g^r_{aa}\ (k_{//}, k_{//}\{\Gamma\})}{\sum_L \int^{(L)} d^2k'_{//} \left|\tilde{T}\ (k'_{//}\{L\})\right|^2 \mathrm{Im} g^r_{\alpha\alpha}(k'_{//}\{L\})\ \mathrm{Im} g^r_{aa}\ (k'_{//}\{L\})}$$

Les quantités primées se rapportent aux vallées L.
Nous avons spécifié ici $k_{//}\{\Gamma\}$ et $k'_{//}\{L\}$ et nous devons sommer sur les vallées L. Les processus étant élastiques, nous avons omis partout d'expliciter l'énergie ω. Il est concevable que, dans certains cas particuliers, le moment de Fermi k_F du métal soit inférieur à k_o. Dans cette situation, le courant spéculaire serait uniquement dû aux vallées situées dans des directions peu inclinées par rapport à la direction du courant. La masse efficace,dans la direction tunnel,de ces vallées est plus élevée et le courant beaucoup plus faible. De tels effets d'anisotropie n'ont, à ce jour, jamais pu être mis en évidence. Il apparaît donc expérimentalement que la densité d'états du métal qui est "sondée" par effet tunnel est pratiquement indépendante de l'orientation des vallées. Sans pouvoir actuellement en pressentir la cause, nous utilisons ce fait expérimental et considérons $\mathrm{Im} g^r_{\alpha\alpha}$ comme une constante ne dépendant pas du moment parallèle. Nous passons maintenant à la limite continue en utilisant les recettes mentionnées plus haut :

.../...

$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} \sim \frac{n\upsilon^2 v_c^2(k_o) \sum_L \int^{(\Gamma)} d^2k_{//} \int_d dx \, [g'^r(o,x,k_{//}\{\Gamma\})]^2 \int^{(L)} \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \, Img^r(x,x,k'_{//}\{L\})}{\frac{1}{2} \sum_L \int^{(L)} d^2k'_{//} \, Img''^r(0,0,k'_{//}\{L\})} \qquad (4.2.7)$$

Dans la direction choisie (110) seules les deux vallées situées dans les directions parallèles au plan de la jonction contribuent au courant spéculaire et toutes deux de façon équivalente . En revanche, les quatre vallées participent de façon analogue au courant dû aux fluctuations. Si nous négligeons les oscillations de la densité d'états pour $x > d$, les formules présentées en Appendice A nous donnent :

$$\int^{(L)} \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \, Img^r(x,x,k'_{//}) = -\rho'_{//} \, r'(\omega)$$

où $\rho'_{//} = \frac{m_{L//}}{2\pi\hbar^2}$ est la densité d'états à deux dimensions,

$m_{L//} = \sqrt{m_t m_l}$ et $r'(\omega) = [\frac{2m_L}{\hbar^2} \omega]^{1/2}$

$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} = \frac{A \int^{(\Gamma)} d^2k_{//} \int_d dx [g'^r(0,x,k_{//}\{\Gamma\})]^2}{\int^{(L)} d^2k'_{//} \, Img''^r(0,0,k'_{//}\{L\})}$$

où $A = -4 \, n\upsilon^2 v_c^2(k_o) \, \rho' r'(\omega)$.

Nous nous bornons au modèle WKB et utilisons les fonctions de Green suivantes :

$$[g'^r(0,x,k_{//}\{\Gamma\})]^2 = \left[\left(\frac{2m_\Gamma}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \frac{K(0)}{q} \exp -2 \int_0^d K(x)dx \times \exp -2q(x-d)$$

$$Img''^r(0,0,k'_{//}\{L\}) = -\frac{2m_L}{\hbar^2} \, 2 \, K'(0) \exp -2 \int_0^{a(\omega,k'_{//})} K'(x) \, dx$$

.../...

La quadrature sur x nous donne 1/2q qui nous indique la profondeur du matériau concerné. Nous terminons cette estimation en considérant comme précédemment que le coefficient de transmission coupe les $k_{//}$ grands et remplaçons la somme sur les $k_{//}$ par πk_c^2 et celle sur $k'_{//}$ par $\pi r'^2$ car, dans les vallées L, $\mu_F < E_o$. Les coefficients de transmission sont pris à $k_{//}$ et $k'_{//} = 0$. De plus, $K/K' \sim (m_\Gamma/m_L)^{1/2}$.
Nous obtenons :

$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} = -\frac{A}{2}\left(\frac{2m_\Gamma}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{2r^2(\omega)}\left(\frac{m_\Gamma}{m_L}\right)^{1/2} g k_c^2 \Big/ \frac{2m_L}{\hbar^2} r'^2$$

où $g \equiv \exp -2\int_o^d K(x)dx \Big/ \exp -2\int_o^a K'(x)dx$ est le gain de transmission dû au changement de vallée et où

$$r(\omega) = \left[\frac{2m_\Gamma}{\hbar^2}(\Delta E - \omega)\right]^{1/2}$$

Nous avons donc, tant que $\Delta E \ll V_b$

$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} = -\frac{A}{4}\frac{E_o}{\omega}\left(\frac{m_\Gamma}{m_L}\right)^{5/2}\frac{g}{\Delta E - \omega} \qquad (4.2.8)$$

Prenons un potentiel coulombien $v_c(k_o) \equiv v_o(k_o) = \frac{4\pi e^2}{\mathcal{V}\varepsilon_s k^2_o}$
Nous avons pour le GaSb

$A \sim 10^{-18}$ CGS, $E_o \sim 40$meV, $\omega \sim \Delta E - \omega = 15$ meV, $m_\Gamma/m_L = 1/2$

et $g \sim 5.10^4$ soit

$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} \sim 0.2 \qquad \text{n-GaSb}$$

Nous voyons que le gain est suffisamment élevé pour compenser la faiblesse de la composante de Fourier du potentiel à $q \sim k_o$. L'incertitude la plus grande provient de la méconnaissance de la force exacte du potentiel à courte distance. Il apparait

.../...

clairement qu'un potentiel coulombien s'avère trop faible pour expliquer l'anomalie de conductance observée dans le n-GaSb à haute pression. Lorsque les vallées s'écartent, ΔE augmente et deux raisons essentielles entraînent une diminution relative des effets de fluctuations. Non seulement le dénominateur augmente avec ΔE, mais le gain diminue typiquement d'un facteur $\frac{1}{e}$ lorsque ΔE augmente de E_o. Dans le n-Ge, par exemple, utilisé par Davis et Steinrisser en barrière MS, l'écartement important des vallées réduit l'effet dont l'ordre de grandeur n'atteint plus que 5.10^{-4} pour un potentiel coulombien.

Si, en fait, la force du potentiel réel à grande distance ($r \sim a_H$) ne dépend que faiblement de la nature de l'impureté comme le montrent les faibles écarts d'énergie d'ionisation observés, il est certain que ceci n'est pas toujours le cas à très courte distance ($r \sim \frac{1}{k_o}$). Ceci a été clairement montré dans le cas du n-Ge par recombinaison radiative[27]. Cette méthode constitue une mesure semiquantitative du potentiel qui nous intéresse. A faible température en effet, la recombinaison entre un électron des vallées L et un trou de la bande de valence à $k \sim 0$ ne peut s'effectuer que si un moment de l'ordre de k_o est apporté par le milieu. L'étude du spectre confirme que les transitions radiatives sont accompagnées soit de l'émission d'un phonon de bord de zone (processus inélastique), soit d'une diffusion sur une impureté (processus élastique). L'élément de matrice de transition par impureté implique de toute évidence la composante de Fourier $v_c(k_o)$ que nous recherchons. La comparaison de l'amplitude des raies élastiques et inélastiques permet d'estimer la force de la composante de Fourier $v_c(k_o)$ du potentiel réel par rapport au potentiel de Coulomb $v_o(k_o)$. Nous présentons en Appendice C les détails de la méthode qui nous permet d'extraire $v_c(k_o)$ à partir des données de photo luminescence. Les valeurs obtenues pour les diverses impuretés dans le germanium sont présentées dans le tableau VIII.

Dopant	$\beta \equiv \frac{v_c^2(k_o)}{v_o^2(k_o)}$	n ($\times 10^{18} cm^{-3}$)	$\langle G_f \rangle / \langle G_{sp} \rangle$
Imp. Coulomb.	1	6.7	5.10^{-4}
Sb	<10	6.7	$<5.10^{-3}$
P	570	-	-
As	1100	5.1	4.10^{-1}

Tableau VIII

L'antimoine est de loin le diffuseur le plus faible. L'examen des énergies d'ionisation respectives indique de façon cohérente que l'augmentation de la force du potentiel à courte distance entraîne un accroissement de l'énergie d'ionisation. Dans la dernière colonne nous avons rapporté le résultat des calculs effectués dans le cas des contacts M.S. étudiés par Davis et Steinrisser[12] en utilisant les valeurs du potentiel "mesurées" par photoluminescence. Si l'effet des fluctuations intervallées est tout-à-fait négligeable dans le cas du dopage à l'antimoine, par contre l'arsenic constitue un diffuseur suffisamment puissant pour que, dans les conditions expérimentales utilisées, cet effet entraîne une conductance voisine de la conductance spéculaire.

Il n'existe pas, à notre connaissance, de détermination expérimentale de l'énergie d'ionisation du tellure dans le n-GaSb en configuration indirecte. Nous pouvons seulement conjecturer, par analogie avec le germanium, que si cette impureté est quelque peu profonde, le potentiel peut se trouver renforcé à courte distance de telle sorte que $v_c^2(k_o)$ soit multiplié par ~ 100. La conductance due aux fluctuations l'emporte alors nettement sur la conductance spéculaire :

$$\frac{\langle G_f \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} \sim 20 \qquad \text{n-GaSb}$$

Cet ordre de grandeur ne nous semble pas déraisonnable et montre qu'il est probable que l'écart de 75 observé expérimentalement soit dû aux diffusions intervallées. Dans les diodes p-n au germanium (fig. 13) ces effets sont responsables de la conductance importante observée au voisinage de V = 0 et leur amplitude sera étudiée de façon commode en relation avec les processus d'émission de phonons de bord de zone. Mentionnons dès à présent que la com-

paraison relative des processus assistés par impuretés et par phonons calculés à l'aide des potentiels du tableau VIII produit des résultats qui sont en excellent accord quantitatif avec les données expérimentales, aussi bien pour l'antimoine que pour l'arsenic et le phosphore.

Nous concluons ce chapitre par quelques remarques. Contrairement aux processus intravallées, le potentiel de diffusion est ici indépendant de la concentration d'impuretés. Dans une gamme raisonnable de niveau de dopage n, on peut considérer que le gain g varie lentement avec n et l'on voit que le rapport $\langle G_f \rangle / \langle G_{sp} \rangle$ est pratiquement proportionnel à n. Une autre différence essentielle provient de l'existence d'un gain de transmission qui dépend de la structure particulière des bandes. Enfin, la force du potentiel de diffusion dépend dramatiquement de la nature de l'impureté. Nous n'avons pas considéré les configurations de bandes telles que le courant spéculaire dans la vallée Γ soit autorisé ($\Delta E < \mu_\Gamma$). Le calcul montre que la contribution des processus intervallées reste du même ordre de grandeur. En revanche, le courant spéculaire de la vallée Γ l'emporte de très loin sur le courant spéculaire des vallées L aussi bien que sur celui qui est dû aux diffusions intervallées et l'expérience ne permet pas de mettre en évidence ces derniers phénomènes. Rappelons que le terme de deuxième ordre est prépondérant et que l'importance des diffusions dans la barrière peut être calculée sans difficulté . Leur importance est négligeable lorsque $\Delta E / V_b \ll 1$. Les diffusions intervallées engendrées par la présence d'impuretés localisées ne semblent pas pouvoir expliquer les écarts anormaux observés dans les contacts MS au germanium. En revanche, elles rendent compte de façon satisfaisante de la conductance anormale observée dans le n-GaSb à haute pression et dans les diodes p-n à gap indirect (Ge).

.../...

IV - 3. Influence de l'interaction électron-phonon

Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre expérimental, la conductance tunnel des contacts M.S. présente, suivant les cas, des anomalies aux polarisations correspondant de près aux énergies de phonons de bord de zone aussi bien que de centre de zone. Parmis ces cerniers, seuls les phonons optiques donnent lieu à des structures notables. Bien qu'un type d'anomalie à $V = 0$ constituée d'un pic de résistance ait été, dans le passé, attribuée par Bennett et al.[28] à une émission de phonons acoustiques dans la barrière, l'expérience a montré que dans de nombreux cas[15,29] cette interprétation ne rendait pas compte des résultats de façon cohérente. Le modèle théorique proposé [25] prévoyait essentiellement qu'en raison de la non conservation du moment dans la direction du courant à l'intérieur de la barrière, l'ensemble du spectre des phonons devait apparaître et qu'ainsi la largeur de l'anomalie à $V = 0$ devait être approximativement égale à l'énergie des phonons acoustiques du bord de zone ω_{TA}. En l'absence de solide confirmation expérimentale, nous pouvons considérer qu'aucune structure due aux phonons acoustiques, autres que ceux du bord de zone, n'a été mise en évidence dans les contacts M.S., sans que la raison de ce fait apparaisse clairement. Après avoir présenté le formalisme général, nous en donnons l'explication et traitons de façon séparée les processus intervallées et les processus intravallées limités alors aux phonons optiques.

Nous suivons une démarche analogue à la précédente en calculant maintenant $G^r_{aa}(k_{//},k_{//},\omega)$ en présence d'interaction électron-phonon. Comme nous l'avons mentionné à l'occasion des effets intervallées de fluctuation de potentiel, il faudrait strictement traiter la self-énergie des phonons en perturbation sur la base des fonctions de Green renormalisées par les impuretés dans chaque vallée. Nous invoquons le même raisonnement d'ordre de grandeur qu'auparavant et négligeons, pour le moment, l'influence des impuretés sur le courant dû aux phonons. Le système considéré est alors invariant par translation dans le plan parallèle à la jonction et la fonction de Green

recherchée s'écrit donc, à l'ordre le plus bas

$$\mathrm{Im}G^r_{aa}(k_{//},k_{//},\omega) = N\,\mathrm{Im}g^r_{aa}(k_{//},\omega) + N\sum_{i,j}\mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//},\omega)\Sigma^r_{ij}(k_{//},\omega)g^r_{ja}(k_{//},\omega)]$$

$$\equiv N[\mathrm{Im}g^r_{aa}(k_{//},\omega) + \mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)]$$

La self énergie de phonons Σ ne comprend, à l'ordre le plus bas, que les propagateurs nus de phonon d^r et d'électron g^r et est définie par :

$$\Sigma^r_{ij}(\omega) = i\sum_{l,m} V_{il}\,V_{mj}\int\frac{d\omega'}{2\pi}\,[d^r_{lm}(\omega-\omega')\,g^-_{ij}(\omega')$$

$$+ d^+_{lm}(\omega-\omega')\,g^r_{ij}(\omega')] \qquad (4.3.1.)$$

$d^{r,a}_{lm}$ et $d^{+,-}_{lm}$ représentent les fonctions de Green des phonons définies de façon analogue à celles qui leur correspondent pour les électrons[16]. V_{ij} décrit le potentiel d'interaction électron-phonon qui, en général, n'est pas local. Sa portée peut devenir importante $r \sim d$, à l'intérieur de la barrière où le champ électrique n'est écranté que par les électrodes voisines.
Le premier terme du développement de $\mathrm{Im}G^r_{aa}$ nous redonne le courant spéculaire, c'est-à-dire le courant de background, en l'absence de fluctuation de potentiel, exprimé par la formule (4.2.2.). La contribution des phonons au courant s'exprime par la même expression dans laquelle $\mathrm{Im}g^r_{aa}(k_{//},\omega)$ est remplacé par $\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)$. De nouveau ce courant s'ajoute au courant spéculaire si $\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}$ et $\mathrm{Im}g^r_{aa}$ sont de même signe et s'en retranche dans le cas contraire. Nous traitons un problème invariant par translation dans le plan parallèle a la jonction et définissons les transformées de Fourier partielles suivantes :

$$X_{i_x j_x}(k_{//},\omega) = \sum_{i_{//}-j_{//}} X_{ij}(\omega)\,\exp -ik_{//}(i_{//}-j_{//})$$

.../...

$$X_{ij}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{k_{//}} X_{i_x j_x}(k_{//},\omega) \exp ik_{//}(i_{//} - j_{//})$$

où X peut être remplacé par g^r, d^r ou V.
Nous avons alors en omettant l'indexation x :

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \sum_{l,m} \sum_{k'_{//}} V_{il}(\Delta_{//})\, V_{mj}(\Delta_{//}) \times$$

$$\int \frac{d\omega'}{2\pi} \times \{ ig^-_{ij}(k'_{//},\omega')\, \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//},\omega)\, d^r_{lm}(\Delta_{//},\omega-\omega')\, g^r_{ja}(k_{//},\omega)]$$

$$+ id^+_{lm}(\Delta_{//},\omega-\omega')\, \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//},\omega)\, g^r_{ij}(k'_{//},\omega')\, g^r_{ja}(k_{//},\omega)]\} \qquad (4.3.2.$$

où $\vec{\Delta}_{//} = \vec{k}_{//} - \vec{k}'_{//}$ est le moment parallèle du phonon d'énergie $\omega-\omega'$. Il apparaît, comme pour les impuretés, une loi de composition stricte des vecteurs d'onde parallèles qui n'a d'autre origine que le caractère oscillant des fonctions d'onde dans le plan de la jonction.

Nous nous plaçons à T = 0°K pour simplifier et utilisons les transformées de Fourier totales des fonctions de Green d^+ et d^r définies par :

$$d^+(q, \Omega) = -2\pi i\delta(\Omega + \omega_q)$$

$$\mathrm{Re}\, d^r(q, \Omega) = \frac{2\omega_q}{\Omega^2-\omega_q^2} \qquad (4.3.3)$$

$$\mathrm{Im}d^r(q, \Omega) = \pi\delta(\Omega + \omega_q) - \pi\delta(\Omega - \omega_q)$$

où ω_q est l'énergie du phonon de vecteur d'onde $\vec{q}$. La densité d'états des phonons n'est autre que $\sigma(\Omega) = \frac{i}{2\pi} \sum_{\vec{q}} d^+(\vec{q}, \Omega)$ pour une branche particulière. Dans la suite de cette étude, nous ne sommes intéressés que par les termesde $\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}$ qui possèdent une

.../...

structure aux énergies caractéristiques des phonons soit $\omega - \omega' \sim \pm \omega_q$ d'après les expressions (4.3.3.). Considérons maintenant la formule (4.3.2). La quadrature sur ω' entraîne que la fonction de Green g^r_{ij} qui intervient dans le second terme devient $g^r_{ij}(k'_{//}, \omega + \omega_q)$. Dans le domaine considéré, les fonctions de Green varient lentement avec l'énergie et ce terme ne donne lieu à aucune structure particulière à $V \sim \pm \omega_q$. En revanche, le premier terme contient une fonction $g^-_{ij}(\omega')$ qui, elle, varie brusquement avec l'énergie lorsque $\omega' \sim \mu_F$ puisqu'elle renferme l'information relative à l'occupation des états :

$$g^-_{ij}(\omega') = -2i\ \mathrm{Im} g^r_{ij}(\omega')\ [f_R(\omega') - 1]$$

La quadrature sur ω' de ce terme fait ressortir des structures importantes à $V \sim \pm \omega_q$. Dorénavant nous omettrons systématiquement d'écrire les termes ne présentant pas de structure aux énergies des phonons et qui ne contribuent qu'à modifier la conductance du background de façon négligeable.

Montrons tout d'abord de quelle façon interviennent les différentes branches de phonons et, en particulier, pour quelle raison les phonons acoustiques de centre de zone n'apparaissent pas de façon notable. Pour cela nous utilisons l'expression (4.3.2) et passons aux transformées de Fourier totales des quantités relatives aux phonons :

$$W_{ij} = \sum_{l,m} V_{il}(\Delta_{//})\ V_{mj}(\Delta_{//})\ d_{lm}(\Delta_{//}, \omega-\omega')$$

$$= \frac{\varepsilon^3}{L^3} \sum_{l,m} \sum_{q_x, q'_x, q''_x} V^{(l)}(q_x, \Delta_{//}) V^{(m)}(q'_x, \Delta_{//})\ d(q''_x, \Delta_{//}, \omega-\omega')$$

$$\times \exp iq_x(i - l) \exp iq'_x(m-j) \exp iq''_x(l-m)$$

.../...

Pour simplifier nous supposons que V ne dépend que faiblement de la position et effectuons alors la somme sur l et m. Nous obtenons :

$$W_{ij} \sim \frac{\varepsilon}{L} \sum_{\vec{q}} V^2(\vec{q}) \exp iq_x(i-j)\, d(\vec{q},\omega-\omega')\, \delta_{\vec{q}_{//},\vec{\Delta}_{//}}$$

expression dans laquelle nous avons réintroduit la somme sur $q_{//}$. Explicitons, par exemple, les termes de l'expression (4.3.2) qui renferment $\mathrm{Im}d^r$ et constituent la partie dissipative de l'interaction électron-phonon : $\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D$

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D = \frac{1}{N}\frac{\varepsilon}{L} \sum_{i,j} \sum_{k'_{//}} \int d\omega' \sum_{\vec{q}} V^2(\vec{q}) \exp iq_x(i-j)$$

$$\times\, \delta_{\vec{q}_{//},\vec{\Delta}_{//}} \times \mathrm{Im}g^r_{ij}\, \mathrm{Re}(g^r_{ai}\, g^r_{ja})\, f_R(\omega') \left[\delta(\omega-\omega'+\omega_q) - \delta(\omega-\omega'-\omega_q)\right]$$

Nous avons omis l'argument des fonctions de Green qui est $k_{//},\omega$ pour g^r_{ai} et g^r_{ja} et $k'_{//},\omega'$ pour g^r_{ij}.

Considérons tout d'abord une vallée unique centrée à $k \sim 0$. A l'intérieur de la barrière, nous voyons que le facteur oscillant $\exp iq_x(i-j)$ introduit une coupure q_c sur q_x. Les phonons qui importent sont ceux qui ne donnent pas lieu à cette interférence destructive, c'est-à-dire que leur vecteur d'onde dans la direction du courant vérifie l'inégalité :

$$0 < q_x < q_c \sim \frac{\pi}{d}$$

Dans l'électrode, nous aurions de façon analogue

$$0 < q_x < q_c \sim k_F$$

où k_F est le vectuer d'onde au niveau de Fermi. La diminution du facteur de transmission lorsque le vecteur d'onde parallèle augmente entraîne de plus une coupure exponentielle sur $\Delta_{//}$: $0 < \Delta_{//} \lesssim k_c$

.../...

où k_c est, lui aussi, inférieur au dixième de la zone de Brillouin. Ces coupures imposent toutes deux que seuls les phonons possédant un vecteur d'onde q faible à l'échelle de la zone de Brillouin peuvent éventuellement contribuer de façon non négligeable. En d'autres termes, nous n'observons que la partie de la densité d'états correspondant aux phonons de centre de zone. En raison de leur faible dispersion dans cette région de l'espace réciproque, les phonons optiques possèdent une grande densité d'états. En revanche, les phonons acoustiques possèdent, dans cette région, une petite densité d'états (spectre de Debye) et, de plus, un couplage de déformation avec les électrons dont la force est faible et tend vers zéro proportionnellement au vecteur d'onde lorsque celui-ci tend à s'annuler. Outre la faiblesse de la structure associée, notons que sa largeur en énergie au voisinage de V = 0 se voit, pour la même raison, réduite à environ $\omega_{TA}/10 \sim 1$ meV. Les résultats de Bennett et al.[28] concernant l'émission dite "cohérente" de phonons acoustiques sont incorrects en ce que les diverses coupures ne sont pas convenablement prises en compte. En conclusion, il semble très improbable que l'expérience puisse détecter des effets si faibles et, qui plus est, si proches de la polarisation nulle.

Si nous considérons maintenant une bande de conduction multivallée, il est clair que les phonons impliqués dans les transitions intervallées sont les phonons de bord de zone de Brillouin. Toutes les branches de phonons présentent une faible dispersion au voisinage de $q \sim k_o$ et, en conséquence, une grande densité d'états. Il n'est donc pas surprenant que les quatre branches apparaissent de façon comparable. L'étude des termes renfermant Red^r, dite partie "dispersive", conduit à des conclusions semblables et la levée de l'hypothèse d'une interaction locale ne les modifie pas. Nous reviendrons, à la fin de ces exposé, sur l'influence des impuretés sur les phénomènes de phonons et mentionnerons si et en quoi leur intervention modifie ces résultats.

.../...

Ainsi, dans toutes les régions de la zone de Brillouin qui nous concernent, la dispersion des phonons à l'échelle du dixième de la zone est inférieure à 1 meV typiquement et peut être raisonnablement négligée. Nous considérons donc des phonons non dispersés de fréquence ω_o indépendante de la position. Nous commenterons quelque peu cette dernière approximation dans le cas des phonons optiques longitudinaux de centre de zone dans des matériaux partiellement polaires tels que les composés III-V. La self-énergie que nous utilisons par la suite s'écrit :

$$\Sigma^r_{ij}(k_{//},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{k'_{//}} P_{ij}(\Delta_{//}) \int \frac{d\omega'}{2\pi}\, g^{r-}_{ij}(k'_{//},\omega')\, d^r(\omega - \omega')$$

$$\text{où} \quad P_{ij}(\Delta_{//}) \equiv \sum_l V_{il}(\Delta_{//})\, V_{lj}(\Delta_{//}) \qquad (4.3.4)$$

Le phonon ne se propage pas et d^r ne dépend que de l'énergie. Nous nous consacrons maintenant à l'étude des mécanismes intervallées qui peuvent donner lieu à d'importantes variations de conductance.

IV - 3.1. Processus intervallées

Nous reprenons le modèle de structure de bande multivallée présenté dans l'introduction et n'effectuons les calculs explicites que pour une vallée L située dans une direction perpendiculaire à celle du courant. Pour une telle vallée, $\Delta_{//} \sim k_o \sim 10^8\ cm^{-1}$, ce qui impose une interaction à très courte distance $|i - l|$ et $|j - l| \sim \frac{1}{k_o}$. A une telle distance, le potentiel est indépendant de la position et nous effectuons la même approximation que dans le cas des impuretés : $V_{il} \sim V\delta_{il}$. Les variations relatives $\delta\Delta_{//}$ de $\Delta_{//}$ par rapport à la valeur k_o sont de l'ordre de 10^{-2} et nous pouvons négliger les variations de V avec $\Delta_{//}$.

.../...

$$V_{il}(\Delta_{//}) \sim V(k_o)\delta_{il}$$

et $$P_{ij}(\Delta_{//}) \sim V^2(k_o)\delta_{ij}$$

La self-énergie est donc elle-même locale $\Sigma_{ij} = \Sigma_i \delta_{ij}$ car le phonon ne se propage pas.
La fonction de Green recherchée s'écrit alors simplement :

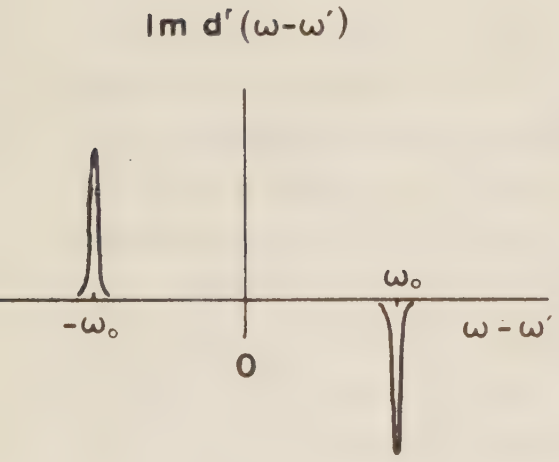
$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega) = \frac{1}{\pi N} V^2(k_o) \sum_i \sum_{k'_{//}} \int d\omega' \times \mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{//},\omega') \times f_R(\omega')$$

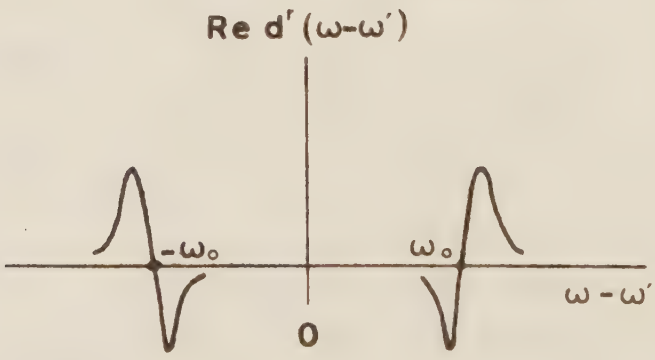
$$\{ \mathrm{Re}[g^r_{ai}(k_{//},\omega)]^2 \ \mathrm{Im}d^r(\omega - \omega') + \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//},\omega)]^2 \ \mathrm{Re}d^r(\omega - \omega')\}$$

$$\equiv \mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D + \mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_R \qquad (4.3.5)$$

où $\mathrm{Im}\, d^r(\omega - \omega') = \pi\delta(\omega - \omega' + \omega_o) - \pi\delta(\omega - \omega' - \omega_o)$

$$\mathrm{Re}d^r(\omega - \omega') = \frac{2\omega_o}{(\omega - \omega')^2 - \omega_o^2}$$

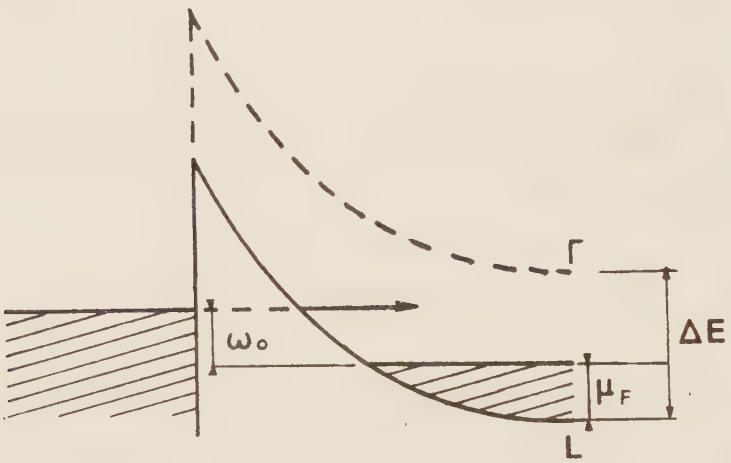




.../...

Le terme du crochet qui fait intervenir Imd^r décrit les effets dissipatifs d'émission réelle de phonons. Celui qui possède le facteur Red^r décrit les processus virtuels dispersifs. Les expressions (4.3.5) décrivent, rappelons-le, les interactions d'électrode aussi bien que les interactions de barrière. Il est commode de discuter séparément les effets dans deux cas typiques de configuration des bandes.

A ⊢ $\underline{\Delta E > \mu_F + \omega_o}$



Discutons, tout d'abord, le cas d'une séparation importante des vallées Γ et L. Plus précisément, nous nous intéressons ici au cas où la vallée Γ est située au-dessus de la vallée L de telle façon que :

$$\Delta E \equiv E_\Gamma - E_L > \mu_F + \omega_o$$

où ω_o est l'énergie du phonon de bord de zone de la branche considérée. C'est typiquement le cas du n-Ge et du n-GaSb à la plus haute pression appliquée 15,7 kbars. Dans ces conditions, les énergies critiques $\omega = \omega' \pm \omega_o$ sont toujours inférieures à l'écartement des vallées ΔE. L'énergie ω est située au-dessous du bas de la vallée Γ et la fonction de Green $g^r_{ai}(\omega)$ est donc purement réelle. Seuls les effets dissipatifs subsistent et l'inté-

.../...

gration sur ω' donne directement :

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D = \frac{1}{N} V^2(k_o) \sum_i \sum_{k'_{//}} [g^r_{ai}(k_{//},\omega)]^2 \times$$

$$\{\mathrm{Im}g^r_{ii}(k'_{//},\omega+\omega_o)\,\theta\,(\mu_F-\omega-\omega_o) + \mathrm{Im}g^r_{ii}(k'_{//},\omega-\omega_o)\,\theta\,(\omega-\omega_o-\mu_F$$

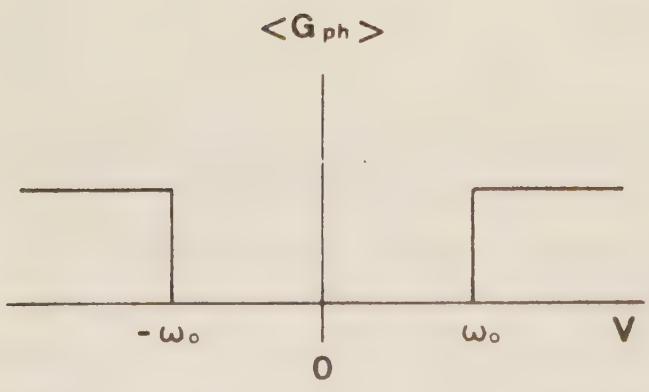
(4.3.6)

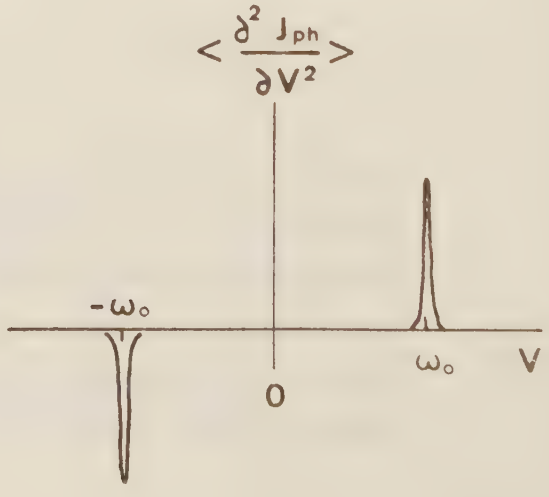
$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_R \equiv 0 \qquad \Delta E > \mu_F + \omega_o$$

La conductance s'obtient en remplaçant ω par $\mu_F - V$. Les deux fonctions échelons deviennent respectivement pour le premier et le deuxième terme :

$$\theta(V-\omega_o) \quad \text{et} \quad \theta(-V-\omega_o)$$

Si nous négligeons l'asymétrie de la jonction et remarquons que $\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}|_D$ est du signe de $\mathrm{Im}g^r_{ii}$ et donc de celui de $\mathrm{Im}g^r_{aa}$, il apparaît que la conductance associée aux phonons $\langle G_{ph}\rangle$ présente des sauts positifs approximativement symétriques à $V = \pm\omega_o$, en d'autres termes les structures de phonons sont "paires".

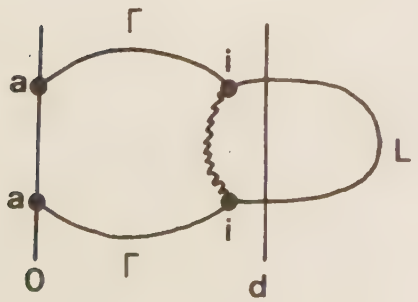


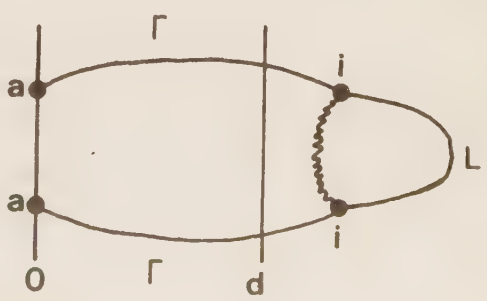


Ce schéma illustre l'allure de la conductance due aux phonons ainsi que sa dérivée que l'on peut comparer avec les résultats expérimentaux (Figures 13 et 14).
Nous pouvons nous attendre à observer une telle structure aux énergies correspondant à chaque branche de phonon en bord de zone avec une amplitude dépendant essentiellement de la force du potentiel d'interaction électron-phonon lié au caractère de la vibration.
Dans la configuration de bande qui nous intéresse, nous pouvons considérer que l'émission réelle de phonons de bord de zone "assistent" l'effet tunnel, en ce sens que ces phonons engendrent de nouveaux chemins. Ces chemins correspondent à une transmission partielle s'effectuant avec les caractèristiques du centre de l'espace réciproque suivie d'un transfert, par émission de phonon, vers les états des vallées L qui possèdent une densité d'états non nulle à l'énergie choisie.

L'étude quantitative de ces effets peut être effectuée de façon commode en les comparant aux diffusions intervallées sur les impuretés. Les seules différences en fait qui existent entre les formules (4.2.6) et (4.3.6) tiennent au fait que $Cv^2(k_o)$ est remplacé par $V^2(k_o)$ et que l'émission de phonons est un processus inélastique. Les mêmes conclusions s'appliquent directement et nous nous contentons de résumer les résultats.

Les contributions de loin les plus importantes proviennent des chemins au cours desquels l'essentiel de la transmission s'effectue dans la vallée Γ et qui bénéficient par là du maximum "d'amplification". Ils correspondent au diagrammes suivants :





En raison de la différence des masses effectives dans les vallées Γ et L, le produit

$$[g^r_{ai}(k_{/\!/}\{\Gamma\},\omega)]^2 \; \mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{/\!/}\{L\},\omega \pm \omega_o)$$

présente une dépendance spatiale analogue à celle qui est représentée page 81 . La région prépondérante est constituée du voisinage immédiat de l'extrémité de la zone déserte. La portée de cette région est limitée, vers l'intérieur de la barrière, par l'évanescence rapide de la densité d'états des vallées L, et au-delà de x = d par celle de $[g^r_{ai}(\Gamma)]^2$. L'importance relative de la région de l'électrode (x > d) et de celle de la barrière est de l'ordre de

$$\frac{K_L}{q_\Gamma} \sim \left(\frac{V_b}{\Delta E}\right)^{1/2}$$

en faveur de la première. Nous pouvons encore une fois estimer l'ordre de grandeur de la conductance en ne considérant que la région de l'électrode.
Seuls le terme d'ordre le plus bas en transitions intervallées est à considérer. En effet, les termes d'ordre supérieur n'apportent aucune "amplification" supplémentaire du coefficient de transmission de telle sorte que le rapport des termes successifs de la série est de l'ordre de 10^{-4}. Ceci explique que l'expérience n'ait pu mettre en évidence des structures correspondant a des multiples de l'énergie des phonons de bord de zone. Nous comparons directement le saut de conductance lié aux phonons a la conductance (V ~ 0) induite par les impuretés ionisées calculée au deuxième ordre et obtenons, à la limite continue :

$$\frac{\langle G_{ph} \rangle}{\langle G_f \rangle} \sim \frac{V_c^2(k_o)}{n\mathcal{V}^2 v_c^2(k_o)} \qquad (4.3.7)$$

Appliquons maintenant cette formule compacte à différentes situations expérimentales.

Diodes p-n

Ce résultat nouspermet de calculer très simplement le rapport des conductances induites par les deux types de transitions intervallées. La situation la plus claire dans laquelle ces transitions sont essentielles est, bien sûr, celle des diodes p-n réalisées sur des semiconducteurs à gap indirect, n-Ge ou n-Si par exemple. Bien que le formalisme général présenté plus haut doive, en principe, être repris et adapté convenablement au cas d'une homojonction, il n'en reste pas moins que ce résultat exprime une réalité physique évidente. Le rapport $\langle G_{ph} \rangle / \langle G_f \rangle$ est pratiquement indépendant des caractéristiques de la jonction et il est aisé de se convaincre que son expression est tout aussi valable dans une barrière p-n. Nous calculons sa valeur dans les situations expérimentales étudiées par Hall (figure 13) pour le cas du phonon longitudinal acoustique LA de bord de zone. $V_c^2(LA)$ a été mesuré par d'autres techniques et estimé dans le n-Ge[17] à 4.3×10^{-49} ergs.cm^3.

Enfin, les potentiels de l'arsenic, du phosphore et de l'antimoine "mesurés"par photoluminescence [27] et rapportés dans le tableau VIII sont injectés dans le calcul. Les résultats sont comparés aux données de Hall dans le tableau IX .

$$\beta \equiv \frac{v_c^2(k_o)}{v_o^2(k_o)}$$

.../...

dopage ($\times 10^{18} cm^{-3}$)	dopant	β	$\langle G_{LA} \rangle / \langle G_f \rangle$ expérimental	$\langle G_{LA} \rangle / \langle G_f \rangle$ calculé
14	Sb	< 10	~ 40	> 13
13	P	570	~ 0.2	0.5
9	As	1100	~ 0.1	0.2

Tableau IX

L'accord obtenu est excellent compte tenu de l'incertitude des valeurs du dopage dans la région active et du caractère de la "mesure" des potentiels d'impuretés. Notons que l'expression de la conductance créée par l'émission de phonons de bord de zone est en tout point analogue à celle que Kleinman avait obtenue par la méthode présentée dans la 3ème partie de cet exposé. Les calculs numériques de cette conductance effectués par cet auteur confirment que l'amplitude absolue $\langle G_{ph} \rangle$ prévue par la théorie est en bon accord quantitatif avec l'expérience et nous dispensent ici de les reprendre dans le présent formalisme. Ceci confirme que la valeur de la conductance liée aux impuretés $\langle G_f \rangle$ est, elle aussi, quantitativement correcte. Ainsi, nous pouvons considérer que l'effet tunnel dans les semiconducteurs à gap indirect constitue une "mesure" de la force du potentiel à courte distance, au même titre que la recombinaison radiative.

Contacts métal-semiconducteur

Les barrières M.S. sont moins bien adaptées à l'observation des phonons de bord de zone pour la simple raison qu'elles présentent, à l'opposé des jonctions p-n convenablement orientées, un courant spéculaire important auquel vient éventuellement s'ajouter une contribution induite par les diffusions intravallées sur les impuretés ionisées. L'étude du chapitre IV - 2 et, a fortiori, les données expérimentales indiquent que dans de nombreux cas l'influence de ces derniers processus n'altère pas de façon importante l'ordre de grandeur de la conductance. Nous étudions successivement le cas des contacts réalisés sur n-Ge et sur n-GaSb ($P > P_1$).

Contacts M/n-Ge

La conductance induite par les phonons de bord de zone peut être calculée de la même façon que celle qui est engendrée par les diffusions intervallées sur impuretés. Les formules (4.2.7) et (4.2.8) s'appliquent directement en remplaçant le potentiel des impuretés par celui de l'interaction électron-phonon et en tenant compte du fait que le processus est inélastique. Le coefficient d'amplification g, défini comme le rapport des coefficients de transmission moyens dans les deux vallées est de l'ordre de 10^3 dans le germanium utilisé. Pour un métal et un semiconducteur donnés, il diminue lorsque le dopage et l'écartement des bandes augmentent. Si sa valeur exacte ne peut être calculée de façon précise que sur ordinateur, il est possible d'estimer ses variations de façon simple, lorsque le niveau de dopage varie, en tenant compte des modifications de la largeur de la barrière. Les résultats du calcul pour $V^2(k_o) = 4.3 \times 10^{-49}$ C.G.S. sont comparés aux données expérimentales dans le tableau X.

.../...

dopage ($\times 10^{18} cm^{-3}$)	dopant	$\langle G_{LA} \rangle / \langle G_{sp} \rangle$ calc.	$\langle G_{LA} \rangle / \langle G \rangle$ exp.
6.7	Sb	1.4×10^{-1}	10^{-1}
5.1	As	1.8×10^{-1}	10^{-1}
9.6	As	4×10^{-2}	2×10^{-2}

tableau X

L'accord obtenu est ici tout-à-fait satisfaisant. Le modèle de Davis et Steinrisser[12] produit des résultats analogues aux nôtres. Leur calcul effectué sur ordinateur prévoit $\sim 10^{-1}$ pour les deux premiers cas et confirme nos estimations. Nous voyons ainsi que l'affaiblissement des structures de phonons lorsque le dopage augmente provient essentiellement de la diminution de "l'amplification" g.

Contacts n/n-GaSb

Terminons ce paragraphe en examinant le cas plus particulier du n-GaSb à haute pression $P > P_1$ (figure 10). Sauf à la pression la plus forte, la condition $\Delta E > \mu_F + \omega_o$ n'est pas vérifiée et nous verrons qu'en polarisation inverse il peut exister des effets réactifs. En direct, cependant, seuls les termes dissipatifs sont non nuls dès que $P > P_1$. Nous nous limitons donc ici à ce sens de polarisation. L'expérience montre que l'amplitude des structures dissipatives croît rapidement entre P_0 et P_1, passe par un maximum à $P = P_1$ et décroît lentement au delà, lorsque l'écartement ΔE des vallées croît avec la pression. Nous observons pour le phonon LA(111)

$$\langle G_{LA} \rangle / \langle G \rangle \sim 0,35 \qquad P > P_1$$

et, rappelons-le : $\langle G \rangle / \langle G_{sp} \rangle \sim 75$

En l'absence de donnée précise sur la force du couplage électron-phonon et celle du potentiel du tellure dans le GaSb, nous utilisons, pour le premier :

$$V_c^2(k_o)|_{GaSb} = V_c^2(k_o)|_{Ge} = 4.3 \times 10^{-49} \text{ergs}^2\text{cm}^3$$

et le potentiel coulombien pour le second ($k_o \sim 8.9 \times 10^7 \text{cm}^{-1}$). Les résultats sont regroupés dans le tableau XI.

Echantillon	n ($\times 10^{18} \text{cm}^{-3}$)	$\langle G_{LA} \rangle / \langle G_{sp} \rangle$ calc.	$\langle G_{LA} \rangle$ calc.	$\langle G_{LA} \rangle / \langle G \rangle$ exp.
JGSP 1	3.8	40	$0.5\langle G \rangle$	0.35
JGSP 7	3.5	45	$0.6\langle G \rangle$	0.35

tableau XI

En raison de la similarité des propriétés mécaniques existant entre le GaSb, le Ge et le GaAs, il est raisonnable de penser que l'erreur commise sur le choix du potentiel $V_c^2(k_o)$ est faible. Les valeurs absolues calculées de $\langle G_{LA} \rangle$ sont en excellent accord avec nos données expérimentales. Ceci confirme que le background observé n'est pas d'origine spéculaire mais provient très probablement des diffusions intervallées sur les impuretés ionisées. Notons enfin que, si les quatre branches de phonons (111) sont observées dans le n-Ge, trois seulement d'entre elles apparaissent dans nos expériences sur le n-GaSb. Nous n'observons en fait qu'une seule raie optique de bord de zone. En l'absence de règle de sélection stricte pour les transitions qui nous conernent, cette observation assez remarquable suggère que les deux branches optiques soient pratiquement dégénérées (à 1 meV près), à haute pression du moins. Nous n'entrons pas plus avant dans la comparaison de l'amplitude relative des structure associées aux différentes branches, tâche qui, en principe, nécessiterait la connaissance de la forme et de la force du couplage électron-phonon correspondant a chacune d'entre elles.

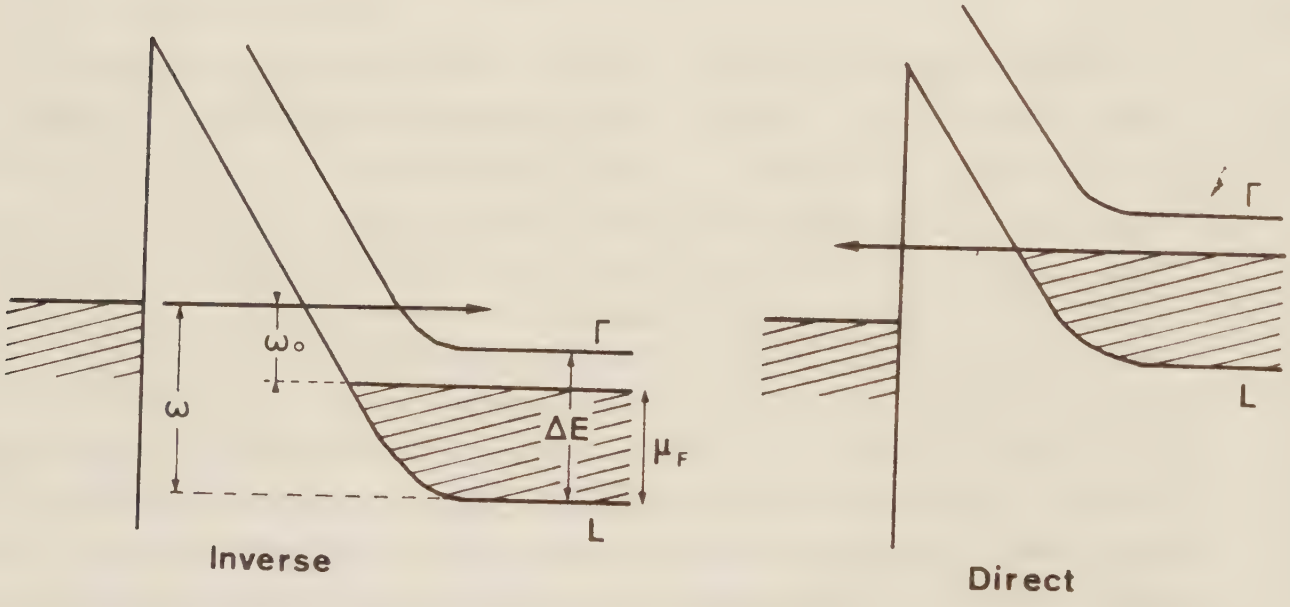
Attachons nous maintenant à décrire les phénomènes qui apparaissent en inverse lorsque l'écartement des vallées est faible.

$$B\} \quad \underline{\mu_F < \Delta E < \mu_F + \omega_o}$$

En direct, aucun phénomène nouveau n'apparaît mais, en inverse, les énergies ω corresondant aux singularités de $Im\delta g^r_{aa}$ sont supérieures a celles du bord de la vallée Γ :

$$\omega \sim \mu_F + \omega_o > \Delta E$$

Le schéma suivant illustre la situation dans les deux sens de polarisation



A cette énergie, la vallée Γ possède une densité d'états finie et la fonction de Green $g^r_{ai}(\omega)$ possède une partie imaginaire. Nous pouvons plus précisément écrire :

$$Im[\epsilon^r_{ai}(k_{//},\omega)]^2 \neq 0 \quad \text{si } \omega - \varepsilon_{//} < \Delta E$$
$$= 0 \quad \text{si } \omega - \varepsilon_{//} < \Delta E$$

où $\varepsilon_{//} = \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_\Gamma}$ et $k_{//} \equiv k_{//}\{\Gamma\}$

La somme sur $k_{//}$ qui intervient dans l'expression du courant se sépare en deux, suivant que $k_{//}$ vérifie la première ou la deuxième de ces conditions. Les termes tels que $\omega - \varepsilon_{//} < \Delta E$ ne donnent lieu qu'aux effets dissipatifs déjà discutés mais subissent l'atténuation du facteur de transmission aux grandes valeurs de $k_{//}$. Leur contribution est positive et paire et son amplitude, relativement plus faible, peut être calculée de la même façon que précédemment. Sans insister plus avant nous ne considérons que les $k_{//}$ tels que $\omega - \varepsilon_{//} > \Delta E$ qui donnent lieu à des phénomènes réactifs aussi bien que dissipatifs. Séparons, encore une fois, ces deux parties. La partie dissipative s'exprime par la formule (4.3.6) à laquelle nous ajoutons la conditions $\omega - \varepsilon_{//} > \Delta E$ et dans laquelle $(g^r_{ai})^2$ est remplacé par $\mathrm{Re}[g^r_{ai}]^2$, sa partie réelle. Les termes réactifs peuvent être obtenus à partir des expressions (4.3.5). $\mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{//}, \omega')$ dépend peu de l'énergie à l'échelle de quelques meV aussi intégrons nous sur ω' en <u>inverse</u> en remplaçant son argument par $(k'_{//}, \omega - \omega_o)$:

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D = \frac{1}{N} V^2(k_o) \sum_i \sum_{k'_{//}} \mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{//}, \omega-\omega_o) \mathrm{Re}[g^r_{ai}(k_{//},\omega)]^2 \theta(\omega-\omega_o-\mu_F)$$

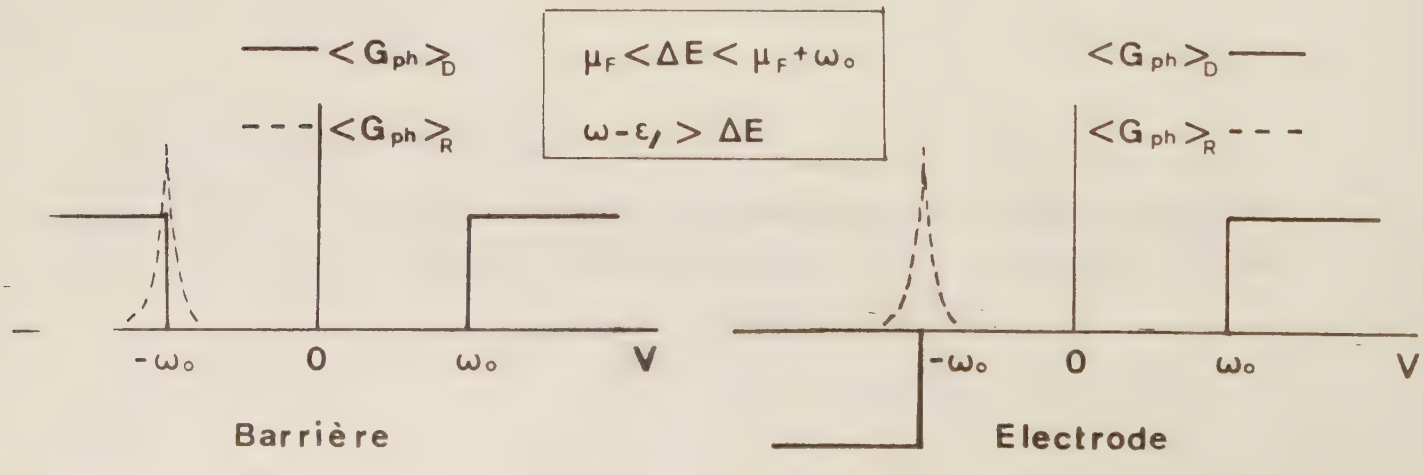
$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_R = -\frac{1}{N\pi} V^2(k_o) \sum_i \sum_{k'_{//}} \mathrm{Im} g^r_{ii}(k'_{//}, \omega-\omega_o)\, \mathrm{Im}[g^r_{ai}(k_{//},\omega)]^2 \mathrm{Log}\frac{|\omega-\mu_F-\omega_o|}{|\omega-\mu_F+\omega_o|} \qquad (4.3.8)$$

$$\Delta E < \mu_F + \omega_o \qquad \text{et} \qquad \omega - \varepsilon_{//} > \Delta E$$

La partie réelle du propagateur de phonons donne lieu à une singularité logarithmique de la conductance lorsque $\omega - \mu_F = -V \sim \omega_o$,

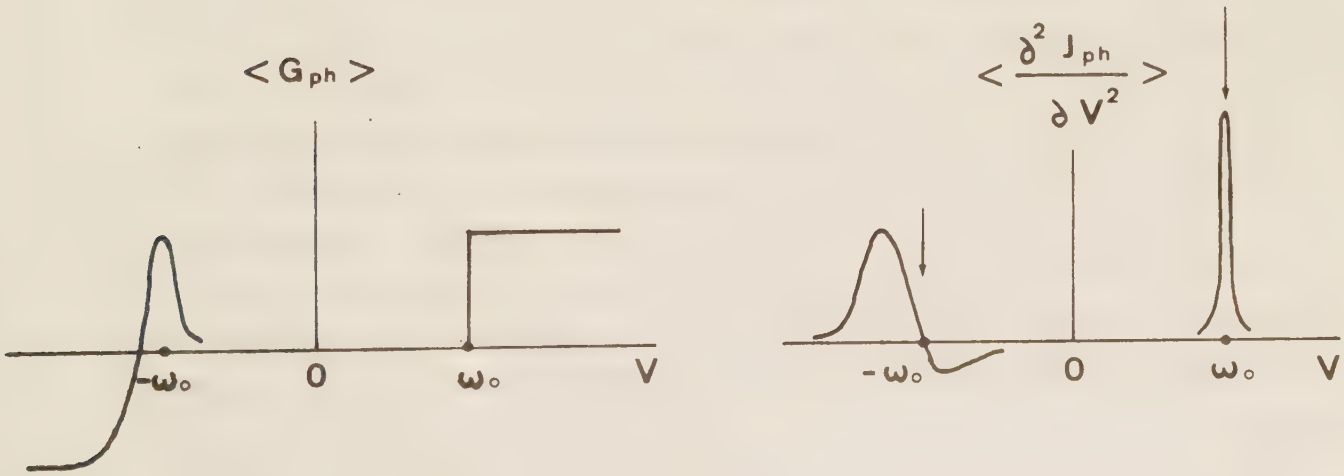
tandis que la partie dissipative entraîne une variation brusque de cette quantité. Contrairement à l'effet étudié dans la section A, il n'est pas trivial de prédire le signe de ces deux structures. La région de l'espace qui apporte la contribution la plus forte est toujours le voisinage immédiat du point tournant. Cependant, au delà de ce point, soit $x > a(\omega,k_{//})$, les fonctions de Green sont oscillantes. $Re(g^r_{ai})^2$ et $Im(g^r_{ai})^2$ n'ont plus de signe défini et les oscillations entraînent une interférence destructive qui limite la portée de la zone active à environ 1/2q. Dans la barrière, soit $x < a(\omega,k_{//})$, ces deux grandeurs sont positives : les processus de barrière donnent lieu a une singularité et à un saut tous deux positifs.

L'effet des interactions dans l'électrode a été déterminé par le calcul dans un certain nombre de situations expérimentales. Ces calculs seront présentés dans le paragraphe concernant les phonons de centre de zone et détaillés plus particulièrement en Appendice B. Mentionnons seulement ici que dans certaines conditions il faut tenir compte du déphasage qui existe entre les fonctions de Green g^r_{ai} et g^r_{ii}. Les calculs présentés dans cette annexe montrent que les interactions électron-phonon qui prennent place à l'extérieur de la barrière donnent lieu sur la conductance à un seuil dissipatif négatif et une singularité dispersive positive. Le schéma suivant résume les caractéristiques des diverses contributions.



L'amplitude relative des différents effets n'est pas respectée dans les schémas et en fait dépend de façon importante de l'écartement des vallées, donc de la pression. Quelques remarques semi-quantitatives peuvent être formulées.

Dans tous les cas, la partie dispersive donne lieu à un pic de conductance en inverse. Lorsque $\Delta E \rightarrow \mu_F + \omega_o$, la partie dispersive tend vers zéro en raison de la diminution de la zone disponible de l'espace réciproque correspondant à $\omega - \varepsilon_{//} > \Delta E$, et la partie dissipative est positive en inverse comme en direct. Lorsque $\Delta E - \mu_F - \omega_o \sim E_o$, la contribution dissipative essentielle provient des termes tels que $\omega - \varepsilon_{//} > \Delta E$. Pour ceux-ci, les effets de barrière tendent à s'opposer aux effets d'électrode. Dans les conditions expérimentales utilisées, le calcul montre que la région extérieure à la barrière l'emporte et le signe résultant est négatif (Appendice B). L'effet des interférences dans l'électrode et l'évanescence dans la barrière entraînent que le rapport de ces deux contributions est typiquement $\frac{K_L}{q_\Gamma}$ en faveur de l'électrode, où maintenant q_Γ est le vecteur d'onde de l'oscillation que présente g^r_{ai} au-dela de la barrière. Cette situation expérimentale correspond à celle du n-GaSb à $P \sim P_1$ (CGSP 7) qui est représentée en figure 10(d). Le schéma suivant présente les résultats prédits par le calcul et doit être comparé à la figure 15.



L'existence d'une contribution dissipative négative tend à diminuer le creux à $|V| < \omega_o$ au profit du pic à $|V| > \omega_o$ et la présence d'une partie réactive positive entraîne un déplacement du pic de dérivée seconde vers les tensions négatives $|V| > \omega_o$. Ces deux aspects sont en excellent accord avec les données expérimentales. La "mesure" précise de l'énergie du phonon est effectuée grâce à la structure située en direct à $V = \omega_o$ qui, elle, est purement dissipative. Enfin, l'amplitude de la partie réactive peut être estimée en tenant compte de la dispersion des phonons et de l'élargissement thermique. La largeur de la raie à tension positive nous fournit une mesure directe de la combinaison de ces deux effets. Notre estimation semi-quantitative consiste à moyenner la singularité logarithmique sur la largeur $2\Delta\omega_o$ mesurée à mi-hauteur (~ 2 meV) et le résultat de ce calcul montre que l'amplitude des contributions réactives et dissipatives sont d'ordres de grandeur voisins. Le facteur $\log \left| \frac{V + \omega_o}{V - \omega_o} \right|$ prend la valeur $\log \left| \frac{\Delta\omega_o}{2\omega_o} \right| \sim -5$ lorsque $V = -\omega_o$ en comparaison de l'unité pour la fonction échelon du terme dissipatif. Ainsi, ni l'une ni l'autre n'est négligeable et l'amplitude relative du pic et du creux de dérivée seconde peut varier assez rapidement avec la pression. L'amplitude absolue $\langle G_{ph} \rangle$ de la structure inverse est comparable à celle de la structure directe. Cependant, dès que $V < \Delta E - \mu_F$, la conductance spéculaire directe de la vallée Γ apparaît et l'emporte de beaucoup sur celle de la vallée L. L'amplitude relative $\langle G_{ph} \rangle / \langle G \rangle$ observée est, pour ce motif, atténuée en inverse par un facteur pouvant atteindre 100.

Nous concluons ce chapitre concernant les transitions intervallées associées à une émission de phonons en rassemblant quelque peu nos divers résultats. Lorsque la séparation des vallées L et Γ est grande, nous pouvons, de même que pour les diffusions intervallées sur impuretés, considérer que l'émission de phonons de bord de zone "assiste" l'effet tunnel en ce sens que

l'interaction électron-phonon apporte des chemins tunnel supplémentaires. Dans ces conditions, les modèles de Kleinman et de Davis produisent des résultats identiques aux nôtres. En revanche, nos expériences ont montré que, lorsque $\Delta E < \mu_F + \omega_o$, leur formalisme ne convient plus. La théorie générale que nous avons utilisée permet de rendre compte de façon complète des phénomènes observés. Dans ce dernier cas, des structures de type dispersif aussi bien que dissipatif apparaissent dont le signe est à priori quelconque. Les contributions des diverses régions de la jonction à l'effet dissipatif sont positives pour les unes et négatives pour les autres de telle sorte qu'elles tendent à se compenser plus ou moins. Le signe résultant dépend de la situations particulière et se trouve être négatif dans les conditions d'expérience choisies. Les termes dispersifs sont tous de même signe et correspondent à une singularité positive de conductance en inverse, en accord avec l'expérience. D'une façon générale, un calcul machine est nécessaire pour déterminer de façon certaine la forme de ces structures dans un matériau et une configuration de bandes donnés. Nous nous sommes bornés, dans la plupart des cas, à effectuer des estimations semi-quantitatives mais rappelons que les calculs numériques peuvent être menés de façon pratiquement exacte. Cependant, la méconnaissance des potentiels d'interaction à courte distance enlève, à notre sens, beaucoup de leur intérêt. La mise en évidence d'une relation extrèmement simple entre les deux types de transitions intervallées apporte un moyen commode de comparer entre elles les forces de ces diverses interactions et nous permet d'atteindre un degré de self-consistence certain dans l'interprétation des données expérimentales. Enfin, nous avons montré que les transitions intervallées multiples ont une probabilité négligeable. Par contre l'émission multiple de phonons de centre de zone et d'un seul phonon de bord de zone représente un effet qui, comme nous le verrons, est mesurable et a en fait été observé dans de nombreuses jonctions p-n ainsi que dans les contact M/n-GaSb sous pression.

.../...

Venons-en maintenant aux interactions des électrons avec les phonons optiques de centre de zone sur lesquelles la littérature est particulièrement riche.

IV - 3.2. - Processus intravallées

Nous ne revenons pas sur les raisons de l'absence de structures notables liées aux phonons acoustiques et ne considérons que la self-énergie des phonons optiques. Dans le cas général d'un matériau partiellement polaire, les énergies des branches optiques longitudinales et transversales sont différentes au voisinage du centre de la zone de Brillouin. Lorsqu'un tel matériau est dopé jusqu'à la dégénérescence, les porteurs libres écrantent le champ électrique à grande distance créé par l'oscillation longitudinale. Il en résulte, comme nous l'avons mentionné page 39, que pour les vecteur d'onde $q \lesssim k_s$, la fréquence ω_{LO} décroît avec q et tend vers ω_{TO} lorsque q tend vers zéro. Dans un contact M.S., l'écrantage dépend de la position et il en résulte que la fréquence des phonons longitudinaux optiques varie spatialement. De plus, les matériaux qui possèdent un caractère polaire présentent aussi un couplage électron-phonon du type polaire qui est non-local. Le potentiel d'interaction correspondant est écranté et présente donc une forme qui, elle aussi, dépend de la position. Cette situation correspond en particulier à celle des composés III-V tels que le GaAs et le GaSb. Nous nous limiterons ici au cas le plus simple du couplage de déformation et négligeons les variations spatiales de fréquence qui demeurent relativement faibles. Dans le matériau non dopé, nous avons :

$$\omega_{LO} - \omega_{TO} \sim \begin{cases} 3 \text{ meV} & \text{GaAs} \\ 2 \text{ meV} & \text{GaSb} \end{cases}$$

Par contre, dans les matériaux non polaires tels que le germanium

et le silicium par exemple, ces deux bandes sont dégénérées au centre de zone. La dispersion des phonons optiques dans cette région de la zone de Brillouin peut être négligée sans inconvénient et la self-énergie est donc de la forme (4.3.4) dans laquelle nous prenons, pour potentiel d'interaction, le potentiel de déformation optique habituel[30] indépendant du vecteur d'onde :

$$V^2(q) \equiv V^2 = \frac{E_1^2\ \omega_o}{2\mathcal{V}\rho v_s^2} \qquad (4.3.9)$$

où E_1 est de l'ordre de 10 eV, $\mathcal{V}$ est le volume, ρ la masse spécifique du matériau et v_s la vitesse du son. Ce potentiel est particulièrement simple et résulte en une self-énergie locale. Les formules sont alors analogues à celles que nous avons établies concernant les transitions intervallées (4.3.8). $V^2(k_o)$ est remplacé par V^2 et $k_{//}$ et $k'_{//}$ se rapportent maintenant à la même vallée.

$$\mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D = \frac{1}{N}V^2 \sum_i \sum_{k'_{//}} \{\mathrm{Re}[g^r_{ai}]^2[\mathrm{Im}g^r_{ii}(k'_{//},\omega-\omega_o)\theta(\omega-\mu_F-\omega_o)$$

$$+ \mathrm{Im}g^r_{ii}(k'_{//},\omega+\omega_o)\ \theta\ (\mu_F-\omega-\omega_o)]$$

$$- \frac{1}{\pi}\ \mathrm{Im}[g^r_{ai}]^2 \mathrm{Im}g^r_{ii}(k'_{//},\omega\pm\omega_o)\log\left|\frac{\omega-\mu_F-\omega_o}{\omega-\mu_F+\omega_o}\right|\}$$

$$\equiv \mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D + \mathrm{Im}\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_R \qquad (4.3.10)$$

Nous avons omis, pour alléger l'écriture, d'expliciter l'argument de g^r_{ai}, à savoir $(k_{//},\omega)$, et nous avons écrit symboliquement $\mathrm{Im}g^r_{ii}(k'_{//},\omega\pm\omega_o)$. Le signe +(-) est celui qui correspond à la singularité logarithmique $\omega \sim \mu_F - \omega_o(\mu_F + \omega_o)$ qui intervient en polarisation directe (inverse). Nous constatons, dès à présent, qu'il ne peut exister de terme dispersif notable que si $\omega > 0$.

.../...

Si $\mu_F > \omega_o$, les énergies critiques ω sont toujours positives. Par contre, lorsque $\mu_F < \omega_o$, il est clair qu'en direct, l'énergie critique $\omega \sim \mu_F - \omega_o$ est négative et seuls subsistent les termes dissipatifs. Dans cette situation $Re[g^r_{ai}]^2$ est positif : lorsque $\mu_F < \omega_o$, la structure en polarisation directe se réduit à une augmentation brusque de conductance. Cette conclusion demeure clairement valable si l'interaction n'est pas locale et l'expérience a permis d'observer une telle structure dans divers matériaux. Nous reviendrons un peu plus loin sur l'estimation de son amplitude. Il est commode de séparer en deux parties la discussion en considérant d'une part les interactions qui prennent place à l'intérieur de la barrière et de l'autre celles qui ont lieu à l'extérieur de celle-ci ($x > a$). La conductance totale induite par l'interaction électron-phonon $\langle G_{ph} \rangle$ est la somme algébrique des contributions de barrière et d'électrode. Nous suivons la même méthode que précédemment et estimons l'amplitude et le signe de cette conductance en la comparant directement à la conductance spéculaire sous la forme :

$$\frac{\langle G_{ph} \rangle}{\langle G_{sp} \rangle} = \frac{\int d^2k_{//}\ Im\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)}{\int d^2k_{//}\ Img^r_{aa}(k_{//},\omega)}$$

a) Interactions dans la barrière

Consacrons nous tout d'abord aux phénomènes dissipatifs. Dans la limite continue, l'expression à calculer est :

$$\frac{\langle G_{ph} \rangle_D}{\langle G_{sp} \rangle} \sim \frac{\int d^2k_{//} V^2 \int dx \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2}\ Re[g^{r'}(0,x,k_{//},\omega)]^2 Img^r(x,x,k'_{//},\omega\pm\omega_o}{\frac{1}{2}\int d^2k_{//}\ Img^{r''}(0,0,k_{//},\omega)}$$

Dans la barrière $Re[g^{r'}]^2$ est toujours positif et $\langle G_{ph} \rangle$ s'ajoute à $\langle G_{sp} \rangle$. D'après les formules présentées en Appendice (A.2), nous pouvons écrire :

$$\mathrm{Re}[g^{r'}(0,x)]^2 \mathrm{Im}g^{r}(x,x) \sim \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{8} \frac{\exp - 2\int_x^a (K'-K)du}{K(x)K'(x)} \mathrm{Im}g^{r''}(0,0)$$

$$x < d$$

où les quantités primées se rapportent à la propagation caractérisée par $k'_{//}$ et $\omega \pm \omega_o$. Cette expression nous montre que les contributions essentielles proviennent, encore une fois, des termes tels que $k_{//}$ et $k'_{//} \lesssim k_c$. Pour $K - K' \lesssim \frac{1}{2a}$, l'ensemble de la barrière contribue de façon analogue. Nous avons approximativement :

$$\frac{\langle G_{ph} \rangle_D}{\langle G_{sp} \rangle} \sim \frac{1}{2\pi} V^2 d k_c^2 \frac{1}{8} \left(\frac{K}{V_b}\right)^2$$

Pour un cas typique (n-GaSb), $V^2 \sim 10^{-46}$ CGS, soit

$$\frac{\langle G_{ph} \rangle_D}{\langle G_{sp} \rangle} \sim 2 \times 10^{-3}$$

Il est en général assez difficile, expérimentalement, de mesurer la partie dissipative d'une structure de phonons si cette structure, comme c'est couramment le cas, possède une partie réactive. Le cas particulier $\mu_F < \omega_o$ dont nous avons parlé plus haut permet d'observer en direct un effet purement dissipatif et de mesurer son amplitude sans ambiguité. Dans ce cas particulier nous pouvons immédiatement calculer la contribution de l'électrode et l'ajouter à celle de la barrière. L'extension de la zone active au delà de $x = d$ est limitée, par l'évanescence de $g^{r'}(0,x)$,

.../...

à environ 1/2q où ici, $q = [\frac{2m}{\hbar^2}(\omega_o - \mu_F)]^{1/2}$. Lorsque $\omega_o - \mu_F \sim 10$ meV, $q \sim 10^6$ cm^{-1} et la contribution de l'électrode est du même ordre de grandeur que celle de la barrière :

$$\left.\frac{\langle G_{ph}\rangle_D}{\langle G_{sp}\rangle}\right|_{\mu_F < \omega_o} \sim 3 \times 10^{-3} \qquad \text{n-GaSb}$$

Cette valeur correspond bien aux données expérimentales observées pour $P > P_1$, c'est-à-dire lorsque la dégénérescence de Fermi (~ 15 meV) ne varie plus avec la pression et que la résistance différentielle est stabilisée (figure 11). Par contre, nous observons une amplification importante de cette structure autour de $P \sim P_o$. L'effet représente jusqu'à 15% de la conductance. Ceci s'explique si nous remarquons que nous avons estimé $\langle G_{sp}\rangle$ en négligeant l'influence de la déformation de la barrière sous l'action de la polarisation. Il faut donc considérer que $\langle G_{sp}\rangle$ calculé exprime la conductance autour de V = 0. Dans les cas classiques ceci a peu d'importance car la conductance varie peu entre V = 0 et $V \sim \pm \omega_o$. Dans le cas particulier du GaSb, nous faisons, en fait, tendre $\mu_F^{(\Gamma)}$ vers zéro en appliquant la pression et à $P \sim P_1$, la conductance diminue d'un facteur 100 entre V = 0 et $V = \pm \omega_o$. L'effet se trouve amplifié d'autant :

$$\left.\frac{\langle G_{ph}\rangle_D}{\langle G\rangle}\right|_{V=\omega_o} \sim \frac{\langle G_{ph}\rangle_D}{\langle G_{sp}\rangle} \times \frac{\langle G\rangle_{V=\omega_o}}{\langle G\rangle_{V=0}} \sim 2 \times 10^{-1}$$

A cette pression nous observons un effet de $1{,}5 \times 10^{-1}$ en bon accord avec cette valeur. A $P > P_1$, la conductance $\langle G\rangle$ est beaucoup plus faible mais ne présente plus de variation importante entre V = 0 et $V = \omega_o$ et l'amplitude de la structure observée redevient de l'ordre de 1%.

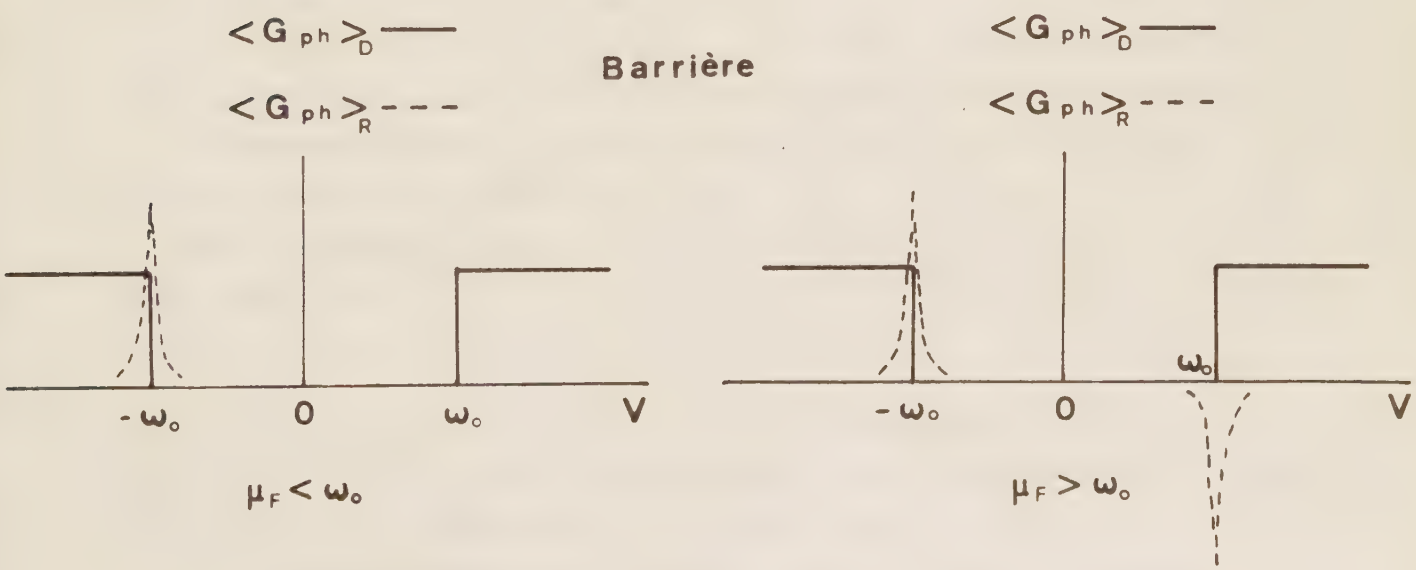
Tournons nous maintenant vers les effets dispersifs intervenant dans la barrière lorsque $\mu_F > \omega_o$. Les termes corres-

pondants font intervenir :

$$\mathrm{Im}[g^{r'}(0,x,k_{//})]^2 \sim \exp -2\int_0^a K(u)du\,[1-\exp -2\int_0^x K(u)du]$$

$$\mathrm{Im}g^{r}(x,x,k'_{//}) \sim \exp -2\int_x^a K'(u)du$$

qui toutes deux décroissent exponentiellement de a vers l'intérieur de la barrière. L'extension de la région de la barrière qui contribue est de l'ordre de $\frac{1}{2K} \sim \frac{d}{10}$. Si nous tenons compte qualitativement de la dispersion des phonons comme nous l'avons fait dans le chapitre précédent, la singularité logarithmique se réduit à un pic dont l'amplitude est environ 5 fois plus grande que celle de la fonction échelon. Ainsi nous pouvons estimer que la partie dispersive de la structure est du même ordre de grandeur que sa partie dissipative. $\mathrm{Im}[g^{r'}(0,x)]^2$ est toujours positive à l'intérieur de la barrière aussi les effets dispersifs se traduisent-ils par un pic de conductance en inverse et un creux en direct. Les schémas suivants résument nos conclusions concernant les interactions intervenant dans la barrière.



Notons, pour terminer ce paragraphe que la région importante de la barrière d'où proviennent les effets dissipatifs n'est pas la même pour les transitions intravallées et pour les transitions intervallées. Pour ces dernières elle se réduit à la proximité du point tournant ($\sim 1/2(K_L - K_\Gamma)$ en raison de la différence de masse des vallées L et Γ.

b) Interactions dans l'électrode

Dans la région de l'électrode, $x > a$, les fonctions de Green sont oscillantes et le signe aussi bien que l'amplitude des effets ne sont pas évidents à priori. Dans le principe, nous pourrions adopter une forme parabolique pour le potentiel moyen de la barrière et calculer exactement les fonctions de Green utiles. Il est plus instructif cependant de choisir un modèle approché qui puisse décrire convenablement un certain nombre de situations. Nous avons choisi l'approximation WKB qui est satisfaisante aussitôt que l'énergie cinétique est supérieure à quelques millivolts pour les matériaux qui nous concernent. La phase des fonctions de Green au point tournant est donc déterminée ($\pi/4$). Par contre, l'abscisse du point tournant dépend du vecteur d'onde q. Ainsi, en un point x donné, la phase des oscillations varie avec q et ces déphasages peuvent devenir importants dans certaines conditions. L'Appendice B est consacré à la présentation de deux modèles de calcul. Le premier ne tient pas compte des déphasages entre les fonctions de Green possédant des vecteurs d'onde différents et le deuxième les prend en compte de façon approchée (q indépendant de x). Les résultats de ces deux modèles sont qualitativement semblables et nous nous bornons ici à rapporter et commenter les résultats de l'approche la plus simple.

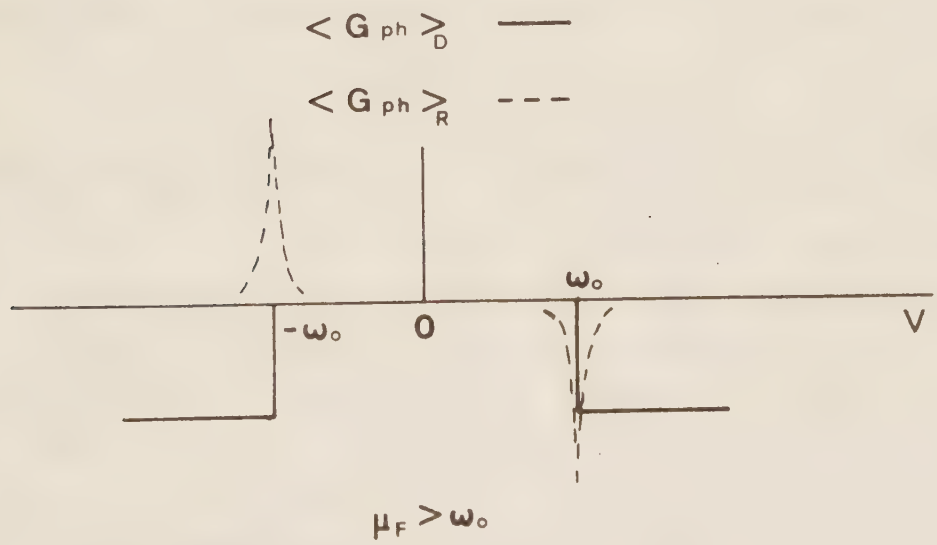
Ce modèle revient à négliger aux énergies considérées le déphasage des fonctions de Green entre le point tournant a et l'extrémité de la zone déserte d. Ce modèle est convenable si la longueur d'onde des oscillations est supérieure à la dis-

tance d-a(q), c'est-à-dire pour des matériaux à faible dégénérescence $\mu_F \lesssim 30$ mV. Le calcul est détaillé en Appendice B et conduit à un certain nombre de conclusions qualitatives qui se voient confirmées lorsqu'on tient compte des déphasages. La plus importante, à notre avis, concerne le signe des différents termes d'interaction dans l'électrode :

a) L'effet dissipatif correspond, en direct et en inverse, à une diminution brusque de conductance. La contribution dissipative de l'électrode est négative.

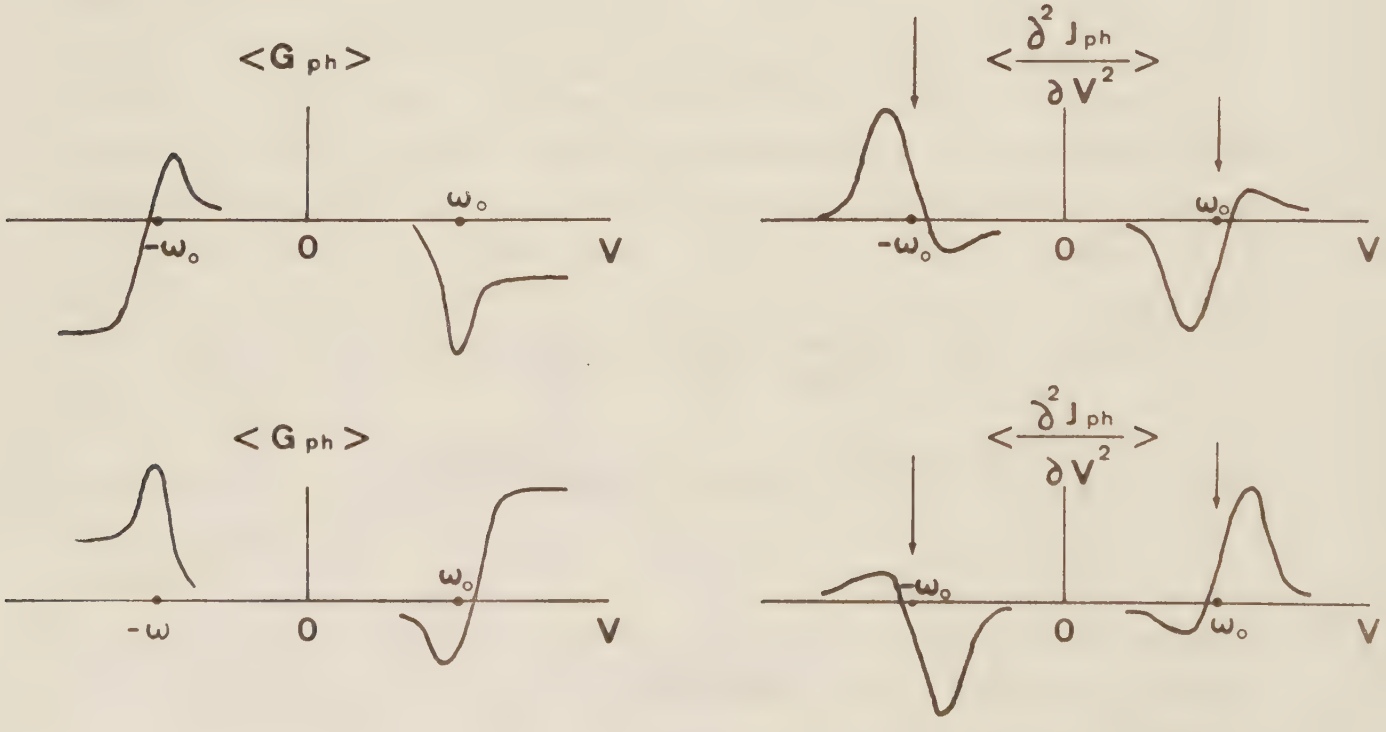
b) Les termes dispersifs donnent lieu à un pic (creux) de conductance en inverse (direct) comme dans le cas des processus de barrière.

Le schéma suivant résume ces résultats



Electrode

Nous voyons que les effets dissipatifs de la barrière et de l'électrode tendent à se compenser alors que les contributions dispersives s'ajoutent. L'extension de la région de l'électrode qui contribue est typiquement de 1/2q si bien que les effets de barrière ont un ordre de grandeur voisin. Si le signe de la partie dispersive est bien déterminé, celui de la partie dissipative peut être positif ou négatif et pas nécessairement le même en direct et en inverse. Seul, à notre sens, un calcul machine peut rendre compte des amplitudes respectives en tenant compte nécessairement des déphasages et de la variation de l'exponentielle de transmission avec q. Les calculs effectués ainsi dans le modèle B 2 indiquent que l'amplitude de la structure dispersive est assez nettement réduite par l'introduction des déphasages mais que la structure dissipative l'est peu. Suivant le signe de la combinaison des effets dissipatifs de barrière et d'électrode nous pouvons, en principe, nous attendre à différents types de raies expérimentales :



Quel que soit le signe de la partie dissipative, toutes ces structures possèdent en commun la forme de leur partie réactive. En dérivée seconde, en direct comme en inverse, la structure dispersive apparaît toujours comme un creux à $|V| \lesssim \omega_o$ suivi d'un pic à $|V| \gtrsim \omega_o$. Ce résultat intéressant est vérifié dans la majorité des cas expérimentaux : n-Si, p-Si, p-Ge, n-CdS, n et p GaAs (direct) et n-GaAs (direct). Par contre, l'amplitude relative du pic et du creux semble dépendre de façon importante de la situation particulière, comme le suggèrent les calculs effectués. Notons au passage que des structures doubles ont été mises en évidence en inverse dans la p-GaAs, le n-GaAs (figure 16) et le n-GaSb. Les deux pics de dérivée seconde se situent au voisinage immédiat des énergies des phonons TO et LO à $k \sim 0$. Ces matériaux sont partiellement polaires et présentent de toute évidence un couplage de type polaire donc non local. De plus, l'interaction est plus ou moins écrantée et la description présentée dans ce chapitre apparaît insuffisante. Ce calcul modèle suggère néanmoins une interprétation des formes que nous avons observées dans le n-GaSb sous pression. Trois formes typiques sont présentées sur la figure 17. La déformation de la structure en direct peut s'expliquer par la diminution de la dégénérescence de Fermi. A pression ordinaire elle correspond essentiellement à un effet dispersif tel que nous l'avons calculé plus haut. A P = 10 kbars, $\mu_F < \omega_o$ et la raie se réduit à un pic c'est-a-dire à un effet purement dissipatif et positif. Aux pressions intermédiaires nous observons une disparition progressive du pic au profit du creux de la raie de dérivée seconde. A 5.4 kbars, par exemple, seul le creux demeure ($V \lesssim \omega_o$). Cette forme peut s'expliquer si l'on considère que la contribution dissipative est négative, autrement dit, si l'émission réelle de phonons dans l'électrode l'emporte. L'étude numérique approfondie d'un cas particulier n'était pas ici notre objectif, nous en resterons à ce point de notre développement.

.../...

Une dernière remarque concernant l'énergie des phonons optiques peut être formulée. Nous avons précisé à la page 120 que l'extension de la région active de l'électrode est ~ 1/2q, soit environ 25 Å pour des matériaux à grande dégénérescence tels que le GaAs ou le GaSb à pression ambiante. Dans cette région qui s'étend au voisinage immédiat de la barrière, l'écrantage est inéfficace. Cette remarque est donc tout-a-fait compatible avec l'observation expérimentale de fréquences LO, et éventuellement TO, correspondant au matériau pur.

Nous avons vu un peu plus haut que les processus impliquant plusieurs phonons de bord de zone sont tout-à-fait improbables. Par contre, il est clair que des effets multiphonons faisant intervenir un phonon de bord de zone et un phonon de centre de zone peuvent apparaître. Ces processus peuvent être traités aisément en considérant les termes d'ordre supérieur du développement en perturbation et l'on peut s'attendre à ce que l'amplitude de la structure à deux phonons soit environ 100 fois plus faible que la structure fondamentale située à l'énergie du phonon de bord de zone. De tels effets ont été observés fréquemment dans les diodes p-n à gap indirect dans lesquelles la conductance induite par les phonons de bord de zone représente une partie importante sinon prépondérante de la conductance totale.

Le développement en perturbation comprend bien entendu des termes faisant intervenir à la fois la self-énergie des phonons et l'interaction avec les impuretés. Si celles-ci donnent lieu à des modes de vibrations localisées, le spectre correspondant peut apparaître. De façon générale, si les fluctuations de potentiel donnent lieu à un courant non négligeable devant le courant spéculaire, il faut, en principe, "renormaliser" les fonctions de Green en présence des impuretés et calculer ensuite les effets de phonons à l'ordre le plus bas.

En regard des méthodes précédemment employées par différents auteurs [19,20], l'approche utilisée ici présente, outre une justification rigoureuse, l'avantage de permettre de traiter à la fois les interactions qui interviennent dans la barrière et celles qui prennent place dans l'électrode. Elle permet sous une forme compacte d'interpréter , qualitativement au moins, l'essentiel des observations expérimentales. Si le formalisme que Davis[20] utilise dans le traitement des phénomènes d'électrode s'apparente à celui-ci, les résultats obtenus par cet auteur nous semblent peu réalistes en raison de l'extension du modèle de barrière carrée à des énergies dépassant 100 meV.

Hormis le cas le plus simple d'émission réelle de phonons de bord de zone, l'interprétation physique des différents effets n'est pas triviale. Les résultats obtenus soulignent combien la classification usuelle en effet tunnel "assisté" (ouverture de nouveaux chemins) et en effets de "self-énergie" est douteuse. Le formalisme exposé ici renferme l'essentiel des ingrédients nécessaires à un calcul précis. Les raisonnements semiquantitatifs que nous avons suivis apportent déja d'importants éclaircissements sur l'apparition et la forme des différentes structures de phonons.

V - CONCLUSIONS

Un certain nombre de conclusions générales se rapportant à la conductance par effet tunnel des contacts métal-semiconducteur peuvent être formulées. La technique de réalisation utilisant le clivage et l'évaporation en ultravide constitue de toute évidence un outil précieux dans l'étude de ces jonctions. Cette méthode avait permis, depuis quelques années déja, d'obtenir un accord quantitatif, dans un certain nombre de cas, entre l'expérience et la théorie fondée sur une transmission spéculaire. Nous avons confirmé qu'un accord similaire existe dans le cas de matériaux à gap direct tels que le GaAs et le GaSb et montré que dans les matériaux a grande dégénérescence ($\mu_F \gg E_o$), le niveau de dopage et la hauteur de barrière peuvent être déterminés par effet tunnel. L'application d'une forte pression hydrostatique constitue une technique puissante qui permet, sur un même échantillon, d'étendre considérablement le domaine de variation des paramètres qui influencent la conductance. Dans le n-GaSb par exemple, les changements de la structure de bande induits par la pression provoquent des modifications dramatiques des caractéristiques d'effet tunnel dont beaucoup font intervenir les interactions des électrons avec les phonons et les impuretés ionisées contenues dans le matériau. En particulier, nous avons ainsi observé des changements nets de la forme et de l'amplitude des structures de phonons et l'apparition d'un courant "assisté" par impuretés dont les approches classiques ne peuvent rendre compte de façon satisfaisante. Le formalisme développé par C. Caroli, R. Combescot, P. Nozières et D. Saint-James [5] est parfaitement adapté au traitement rigoureux de ce type d'effets. Son application au traitement des inter-

.../...

actions dans les contacts M.S. nous a permis de formuler de façon générale l'influence des impuretés et du couplage électron-phonon. Cette approche met en évidence de façon compacte les analogies qui existent entre les différents effets et permet d'obtenir leur ordre de grandeur simplement. Un traitement semi-quantitatif conduit à la détermination des signes et de l'importance des diverses contributions. En particulier, nous avons ainsi pu chiffrer la contribution, à la conductance, des diffusions sur impuretés et apporté l'interprétation de l'effet tunnel "assisté" par les impuretés dans les diodes p-n réalisées sur des matériaux à gap indirect. L'étude du couplage électron-phonon nous a conduits a montrer l'existence de régions privilégiées dans la zone de Brillouin et à expliquer qualitativement la forme et l'évolution des raies observées. La détermination quantitative de ces structures ne pose plus qu'un problème de calcul numérique pour lequel il est nécessaire de connaître la forme et la force des interactions et l'expression précise des fonctions de Green dans la région active de la jonction.

Bien loin d'avoir épuisé le sujet de l'effet tunnel dans les contacts métal-semiconducteur , nous estimons que l'ensemble des techniques expérimentales et théoriques utilisées dans ce travail permet, au contraire, d'envisager de nouveaux développements dans ce type d'étude et éventuellement leur application à la détermination des propriétés des matériaux ainsi qu'a celle des interactions qui y prennent place.

APPENDICES

A - EXPRESSION DES FONCTIONS DE GREEN

Au cours de cet exposé nous utilisons fréquemment le propagateur g^r associé à la région du semiconducteur isolé en l'absence de fluctuation de potentiel et d'interaction électron-phonon. g^r représente le système "non perturbé". Nous calculons ici son expression dans la représentation continue et pour différents modèles de barrière. Nous citons le modèle de barrière carrée qui, par sa simplicité, permet d'effectuer des estimations semi-quantitatives de façon commode. Assimiler le potentiel moyen d'une barrière métal-semiconducteur à un potentiel parabolique constitue, comme nous l'avons vu plus haut, une approximation raisonnable. L'équation de Schrödinger, en présence d'un tel potentiel, peut être résolue exactement, et les fonctions de Green obtenues font alors intervenir les fonctions paraboliques cylindriques [31]. L'inconvénient de ce modèle quasi exact tient à l'emploi malaisé de ces fonctions qui implique un recours fréquent à l'ordinateur. Tout en conservant la possibilité de traiter le problème exactement dans ce modèle parabolique, il est instructif de le résoudre de façon plus générale mais approximative sans présumer de la forme particulière du potentiel. Nous utilisons l'approximation WKB dont les limites de validité peuvent être déterminées en comparant les fonctions d'onde obtenues aux fonctions d'onde calculées exactement dans le cas du potentiel parabolique.

Pour un tel potentiel, les fonctions propres du système s'écrivent :

$$\psi(q) \sim \sin[q(x - d) - \theta q] \qquad x > d$$

$$\sim [U^2(\alpha,0) - \alpha^{-1}U'^2(\alpha,0)]^{-1/2}\, U(\alpha,\eta) \qquad x < d$$

.../...

où $\alpha = -\lambda_o^2 q^2$ $\qquad q = [\frac{2m}{\hbar^2}(\omega - \varepsilon_{//})]^{1/2}$

$\eta = \frac{d-x}{\lambda_o}$

et $\lambda_o = (\hbar^2 \varepsilon_S / 16\pi m^* e^2 n)^{1/4}$

θ_q est la phase à x = d

$U(\alpha,\eta)$ est une fonction parabolique du cylindre qui décroît exponentiellement lorsque $\eta \to \infty$ [31].

Lorsque $q \to 0$ le point tournant a tend vers d et la phase au point tournant ($\sim \theta_q$) tend vers zéro comme dans le cas de la barrière carrée. Aussitôt que $\omega - \varepsilon_{//} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}$ dépasse quelques millivolts pour les matériaux considérés, l'approximation WKB représente convenablement la fonction d'onde dans la mesure où la phase au point tournant reste pratiquement indépendante de q et la fonction d'onde peut alors s'écrire :

$$\psi(q) \sim \cos\left[\int_a^x q(u)du - \frac{\pi}{4}\right]$$

Les fonctions de Green sont calculées en résolvant directement l'équation différentielle à laquelle elles obéissent. Le système non perturbé a été choisi invariant par translation dans le plan parallèle à la jonctions aussi le problème posé est-il unidimensionnel. Nous présentons le calcul à une bande dans l'approximation de la masse effective. L'équation différentielle à résoudre est alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - \omega\right] g^r(x,y,\omega) = \delta(x-y)$$

Recherchant la fonction de Green g^r du semiconducteur <u>isolé</u> en présence du potentiel moyen de la barrière, nous définissons V(x) de la façon suivante :

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leqslant 0 \\ \overline{V}(x) & 0 < x \leqslant d \\ 0 & x > d \end{cases}$$

Les différents coefficients sont déterminés par les conditions aux limites, à savoir :

(i) la continuation analytique de g^r ne possède pas de pôle dans le demi plan ω situé au dessus de l'axe ω réel ;

(ii) $g^r = 0$ pour x ou $y = 0$;

(iii) g^r est continue lorsque $x = y$ alors que $\frac{\partial g^r}{\partial x}$ possède une discontinuité $-\frac{2m^*}{\hbar^2}$;

(iiii) g^r et $\frac{\partial g^r}{\partial x}$ sont continues au point tournant.

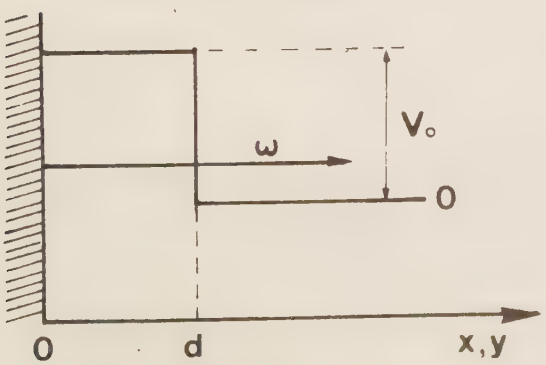
Rappelons que l'origine des énergies ω est choisie au bas de la bande de conduction.

A - 1. Barrière carrée

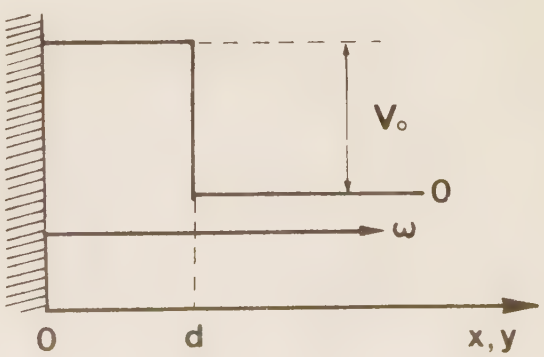
Ce modèle, dont nous limitons l'usage à une information qualitative, est caractérisé par

$$\overline{V}(x) = V_o = \text{Cte}$$

Séparons deux cas suivant le signe de ω, qui sont illustrés par les schémas suivants :



$\omega > 0$



$\omega < 0$

A - 1.1. $\omega > 0$

$$g^r(x,y) = \begin{cases} -\frac{2m^*}{\hbar^2}\frac{shKx}{KD}\left[(K+iq)e^{K(y-d)} + (K-iq)e^{-K(y-d)}\right] & 0 \leqslant x < y \leqslant d \\ -\frac{2m^*}{\hbar^2}\frac{shKy}{KD}\left[(K+iq)e^{K(x-d)} + (K-iq)e^{-K(x-d)}\right] & 0 \leqslant y < x \leqslant d \\ -\frac{2m^*}{\hbar^2}\frac{shKy}{KD}\,2K\,e^{iq(x-d)} & 0 \leqslant y < d < x \\ -\frac{2m^*}{\hbar^2}\frac{i}{2q}\,e^{iq(x-d)}\left[e^{-iq(y-d)} - \frac{K+iq}{K-iq}e^{iq(y-d)}\right] & d < y < x \end{cases}$$

où $q = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2}\omega\right]^{1/2}$ $\qquad K = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2}(V_o - \omega)\right]^{1/2}$

et $D \equiv (K+iq)e^{-Ka} + (K-iq)e^{Ka}$

A - 1.2. $\omega < 0$

D'après sa définition, $g^r(x,y)$ est purement réelle. Les fonctions de Green que nous utilisons le plus fréquemment sont telles que l'un des points, y par exemple, se trouve à l'intérieur de la barrière ($y < d$). Les expressions pour $0 \leqslant x < y \leqslant d$, $0 \leqslant y < x \leqslant d$ et $0 \leqslant y < d < x$ s'obtiennent directement à partir des trois formules correspondantes du cas précédent $\omega > 0$ en remplaçant q par iq, où maintenant,

$$q = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2}(-\omega)\right]^{1/2}$$

est le facteur d'évanescence de la fonction de Green pour $x > d$ comme l'exprime l'expression particulière suivante :

$$g^r(x,y) = -\frac{2m^*}{\hbar^2}\,\frac{\mathrm{sh}Ky}{KD_o}\,2K\,e^{-q(x-d)} \qquad 0 \leqslant y < d < x$$

où $D_o \equiv (K+q)\,e^{Kd} + (K-q)\,e^{-Kd}$

En pratique, les semiconducteurs utilisés sont tels que $q \ll K$ et $e^{Kd} \gg e^{-Kd}$.

A - 2. Modèle WKB

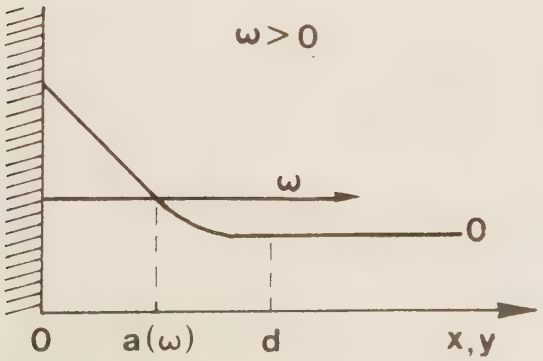
Nous prodédons de la même façon que pour la barrière carrée mais utilisons, au lieu de la condition (iiii), les formules de raccordement classiques entre les formules asymptotiques [32] :

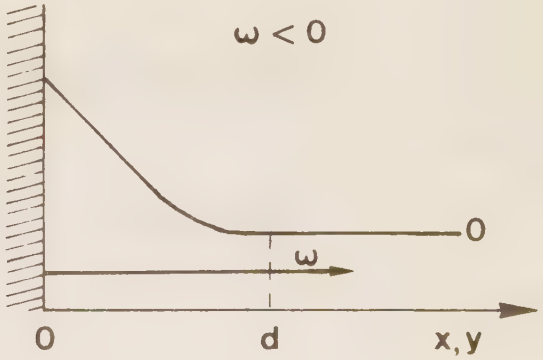
$$x \ll a \qquad\qquad x \gg a$$

$$\frac{1}{\sqrt{K(x)}}\,\exp\int_x^a K(u)\,du \longleftrightarrow -\frac{1}{\sqrt{q(x)}}\,\sin\left(\int_a^x q(u)\,du - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\frac{1}{2\sqrt{K(x)}}\,\exp-\int_x^a K(u)\,du \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{q(x)}}\,\cos\left(\int_a^x q(u)\,du - \frac{\pi}{4}\right)$$

Maintenant $\overline{V}(x)$ n'est pas spécifié et K et q dépendent de la position. Les calculs dont les résultats sont rapportés en Annexe I sont effectués soit avec une forme parabolique, soit avec une forme parabolique-exponentielle[3]. d représente l'extrèmité de la zone déserte et $a(\omega)$ est le point tournant. Considérons encore les deux cas $\omega > 0$ et $\omega < 0$ corespondant aux schémas suivants .





Pour alléger l'écriture, nous n'explicitons pas l'argument des intégrales lorsque celui-ci est K(u)du. La barrière étant épaisse, $\int_o^a K(u)du$ est supérieur à 10 et nous pouvons toujours négliger $\exp -\int_o^a K(u)du$ devant $\exp \int_o^a K(u)du$.

A - 2.1. $\omega > 0$

$$g^r(x,y) = \begin{cases} -\frac{2m^*}{\hbar^2}\left[\frac{1}{K(x)K(y)}\right]^{1/2} \frac{\operatorname{sh}\int_o^x}{D}\left[\exp\int_a^y -2i\exp -\int_a^y\right] & 0 \leqslant x < y < a \\ -\frac{2m^*}{\hbar^2}\left[\frac{1}{K(y)K(x)}\right]^{1/2} \frac{\operatorname{sh}\int_o^y}{D}\left[\exp\int_a^x -2i\exp -\int_a^x\right] & 0 \leqslant y < x < a \\ -\frac{2m^*}{\hbar^2}\left[\frac{1}{q(x)K(y)}\right]^{1/2} \frac{2\operatorname{sh}\int_o^y}{D}\exp i\left(\int_a^x q(u)du - \frac{\pi}{4}\right) & 0 \leqslant y < a < x \\ -i\frac{2m^*}{\hbar^2}\left[\frac{1}{q(x)q(y)}\right]^{1/2}\cos\left(\int_a^y q(u)du - \frac{\pi}{4}\right)\exp i\left(\int_a^x q(u)du - \frac{\pi}{4}\right) & 0 < a < y < x \end{cases}$$

où $q(u) = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2}(\omega - V(u))\right]^{1/2}$ pour $x > a$

$K(u) = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2}(V(u) - \omega)\right]^{1/2}$ pour $0 < u < a$

$D \equiv \exp -\int_o^a K(u)\,du - 2i\exp\int_o^a K(u)\,du \sim -2i\exp\int_o^a K(u)\,du$

A - 2.2. $\omega < 0$

$$g^r(x,y) = \begin{cases} -\frac{2m^*}{\hbar^2}\left[\frac{1}{K(x)K(y)}\right]^{1/2}\exp -\int_o^y \times \operatorname{sh}\int_o^x & 0 < x < y \\ -\frac{2m^*}{\hbar^2}\left[\frac{1}{K(y)K(x)}\right]^{1/2}\exp -\int_o^x \times \operatorname{sh}\int_o^y & 0 < y < x \end{cases}$$

Les grandeurs fréquemment utilisées se calculent directement. La conductance spéculaire fait intervenir la quantité suivante :

$$\mathrm{Img}^{r''}(0,0) = -\frac{2m^*}{\hbar^2}\, 2K(0)\, \exp -2\int_0^a K(u)du \qquad (A.1)$$

Nous voyons apparaître le coefficient de transmission WKB habituel : $\exp - 2\int_0^a K(u)du$.
Le traitement des interactions avec les phonons et les impuretés à l'intérieur de la barrière fait apparaître

$$\frac{\mathrm{Reg}^{r'}(0,x)\,\mathrm{Img}^{r}(x,y)\,\mathrm{Reg}^{r'}(y,o)}{\mathrm{Img}^{r''}(0,0)} \sim \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{8}\, \frac{\exp -\left[\int_x^a (K'-K)du + \int_y^a (K'-K)du\right]}{[K(x)K'(x)K(y)K'(y)]^{1/2}} \qquad (A.2)$$

K et K' se rapportent respectivement à la propagation de 0 à x et de y à 0 avec $k_{//}$ d'une part, et à celle de x à y avec $k'_{//}$. Si le transfert de moment $\vec{\Delta}_{//} = \vec{k}_{//} - \vec{k}'_{//}$ est faible devant $\frac{1}{d}$, cette expression se réduit à la suivante :

$$\sim \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{8}\, \frac{1}{K(x)K(y)} \sim \frac{1}{8}\left(\frac{K}{V_b}\right)^2 \qquad (A.3)$$

dont la dépendance spatiale est faible.

La densité d'états à une dimension ($k_{//}$ fixé) s'exprime par :

$$\rho(x,k_{//},\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Img}^{r}(x,x,k_{//},\omega) \qquad \text{où}$$

$$\mathrm{Img}^{r}(x,x,k_{//},\omega) = \begin{cases} -\dfrac{2m^*}{\hbar^2}\,\dfrac{1}{2q(x)}\left[1 + \sin 2\int_a^x q(u)du\right] & x > a \\ -\dfrac{2m^*}{\hbar^2}\,\dfrac{1}{4K(x)}\,\exp -2\displaystyle\int_x^a K(u)du & x < a \end{cases} \qquad (A.4)$$

.../...

Elle est oscillante à $x > a$ et décroit rapidement à l'intérieur de la barrière. La densité d'états à trois dimensions $\rho(x, \omega)$ s'obtient en intégrant sur $k_{//}$ et possède alors l'allure représentée sur le schéma de la page 81. L'autre quantité décrite sur le même schéma $[g^{r'}(0,x)]^2$ présente une décroissance quasi exponentielle depuis l'interface, comme le montre directement l'examen de la dérivée par rapport à y de la fonction $g^r(x,y)$ pour $\omega < 0$.

B - STRUCTURES DE PHONONS

Notre but est ici de préciser les caractéristiques des contributions dissipatives et réactives à la conductance liée à l'interaction électron-phonon. Le signe de ces effets nous importe davantage que leur amplitude. Le signe des structures correspondant aux interactions qui prennent place à l'intérieur de la barrière est aisé a déterminer car, dans cette région, les fonctions de Green ont un signe bien défini. Nous n'étudierons ici que les processus qui ont lieu dans l'électrode, c'est-a-dire à l'extérieur de la barrière $x > a$, région où les fonctions de Green oscillent et où le signe des structures n'est pas évident a priori. Nous nous limitons, rappelons-le, au cas des phonons non dispersés et ne présentons que les calculs correspondant à une interaction électron-phonon locale.

La formule (4.3.5) nous indique que nous avons à calculer deux quantités qui, à la limite continue, s'expriment par :

$$D(k_{//},\omega) \equiv \int_a dx \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \; \mathrm{Re}\,[g^{r'}(0,x,k_{//},\omega)]^2 \mathrm{Im}g^r(x,x,k'_{//},\omega\pm\omega_o)$$

$$R(k_{//},\omega) \equiv \int_a dx \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \; \mathrm{Im}\,[g^{r'}(0,x,k_{//},\omega)]^2 \; \mathrm{Im}g^r(x,x,k'_{//},\omega\pm\omega_o) \qquad (B.1)$$

Le signe +(-) correspond à la polarisation directe (inverse). $D(k_{//},\omega)$ et $R(k_{//},\omega)$ interviennent respectivement dans l'expression des effets dissipatifs et celle des effets réactifs.

Nous avons, pour $\omega > 0$ et $x > a$:

$$\mathrm{Im}g^r(x,x,k'_{//},\omega) = -\frac{2m'}{\hbar^2}\frac{1}{2q'(x)}\left[1 + \sin 2\int_{a'}^{x} q'(u)du\right]$$

.../...

$$\mathrm{Re}[g^{r'}(0,x,k_{//},\omega)]^2 = -\frac{A}{q(x)} \sin 2\int_a^x q(u)du \qquad (B.2)$$

$$\mathrm{Im}[g^{r'}(0,x,k_{//},\omega)]^2 = \frac{A}{q(x)} \cos 2\int_a^x q(u)\,du$$

où $A \equiv (\frac{2m^*}{\hbar^2})^2 K(0) \exp -2\int_o^a K(u)du > 0$

Les quantités primées se rapportent aux caractéristiques de la propagation $[g^r(x,x)]$ qui s'effectue avec le vecteur d'onde $k'_{//}$ et l'énergie $\omega \pm \omega_o$.

Notons que l'abscisse a(q) [a'(q')] dépend de q[q']. La région d'intégration sur x dépend donc de q et de q'. Dans l'approximation WKB, la phase de la fonction d'onde au point tournant est $\frac{\pi}{4}$ c'est-a-dire une constante. En raison de la variation de l'abscisse du point tournant avec q et q', les fonctions de Green qui interviennent dans l'expression de D et R présentent donc entre elles un déphasage variable dont il faut, en général, tenir compte si l'on veut s'assurer du signe des divers effets. Nous présentons tout d'abord un modèle qui néglige ces déphasages et autorise un traitement analytique simple. Ce modèle n'est en fait justifié que si ces déphasages sont faibles, en d'autres termes, si la longueur d'onde $\frac{2\pi}{q}$ est supérieure a la distance d - a(q). Il peut donc s'appliquer aux cas de dégénérescence relativement faible : $\mu_F \lesssim 30$ meV typiquement pour le n-GaSb.

B - 1. Calcul sans déphasage

Nous pouvons, dans l'approximation choisie, négliger de plus les variations de q(x) entre a et d. L'examen des fonctions d'onde exactes montre que cette approximation est convenable tant que la fonction d'onde présente peu d'oscillations entre ces deux points. Les expressions recherchées s'écrivent alors :

$$D(k_{//},\omega) = \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \frac{A\ B}{qq'} \int_a dx\ [1 + \sin 2q'(x - a)] \sin 2q(x-a)$$

$$R(k_{//},\omega) = - \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \frac{A\ B}{qq'} \int_a dx\ [1 + \sin 2q'(x - a)] \cos 2q(x-a)$$

où $B = \frac{m'}{\hbar^2}$

Nous effectuons l'intégration sur x en utilisant la relation

$$\int_o^\infty dw\ e^{2iqw - \varepsilon w} = \frac{\pi}{2} \delta(q) + iP(\frac{1}{2q})$$

et obtenons :

$$D(k_{//},\omega) = + \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \frac{A\ B}{qq'} \{ P(\frac{1}{2q}) + \frac{\pi}{4} [\delta(q' - q) - \delta(q' + q)] \}$$

$$R(k_{//},\omega) = - \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \frac{A\ B}{qq'} \{ \frac{\pi}{2} \delta(q) + \frac{1}{4} [P(\frac{1}{q + q'}) + P(\frac{1}{q' - q})] \} \qquad (B.3)$$

$\delta(q)$ implique que q soit nul et $\delta(q + q')$ que q et q' à la fois soient nuls. L'approximation WKB n'est pas applicable à ces deux cas mais l'examen des fonctions exactes nous indique clairement que ces limites où q et/ou q' tendent vers zéro peuvent être traitées dans un modèle de barrière carrée et que les termes correspondants donnent lieu à une contribution nulle. Nous éliminons ces termes et effectuons l'intégration sur $k'_{//}$ en utilisant les changements de variables suivants :

$$\int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \rightarrow \rho'_{//} \int d\varepsilon'_{//} \rightarrow \rho'_{//} \frac{\hbar^2}{m'} \int_o^{r'} dq'\ q'$$

où $\rho'_{//} = \frac{m'}{2\pi\hbar^2}$ et $r' = [\frac{2m'}{\hbar^2} (\omega \pm \omega_o)]^{1/2}$

.../...

Nous avons alors

$$D(k_{//},\omega) = \rho'_{//} \frac{A}{q} r' \left[P\left(\frac{1}{2q}\right) + \frac{\pi}{4r'} \theta(r' - q)\right]$$

$$R(k_{//},\omega) = - \rho'_{//} \frac{A}{q} \log \left|1 - \frac{r'^2}{q^2}\right|$$

Ainsi, $D(k_{//},\omega)$ est toujours positif et $Im\delta g^r_{aa}(k_{//},\omega)\big|_D$ exprimé par la formule (4.3.5) est donc du signe contraire de Img^r_{aa} : les effets dissipatifs d'électrode $x > a$ provoquent une <u>diminution</u> brusque de conductance, c'est-à-dire une structure de signe opposé à celui qu'entraînent les processus de barrière. Le signe de R, par contre, n'est pas constant et ne peut être déterminé qu'en effectuant l'intégration sur $k_{//}$. Si nous négligeons les variations de K et de $\tilde{T}$ avec $k_{//}$, nous pouvons calculer cette intégrale en effectuant des changements de variables analogues aux précédents. Lorsque $E_o \sim \mu_F$, en effet, le coefficient de transmission varie peu avec $k_{//}$. Nous obtenons

$$R \equiv \int \frac{d^2k_{//}}{(2\pi)^2} R(k_{//},\omega) = -\rho_{//}\rho'_{//} \frac{\hbar^2}{m} A \int_o^r \log \left|1 - \frac{r'^2}{q^2}\right| dq$$

$$R = - \rho_{//}\rho'_{//} \frac{\hbar^2}{m} A \{(r'+r) \log(r'+r) + (r-r') \log|r-r'| - 2r\log r\} \quad (B.4$$

$$R = - \rho_{//}\rho'_{//} \frac{\hbar^2}{m} A \times \frac{1}{r} F(u)$$

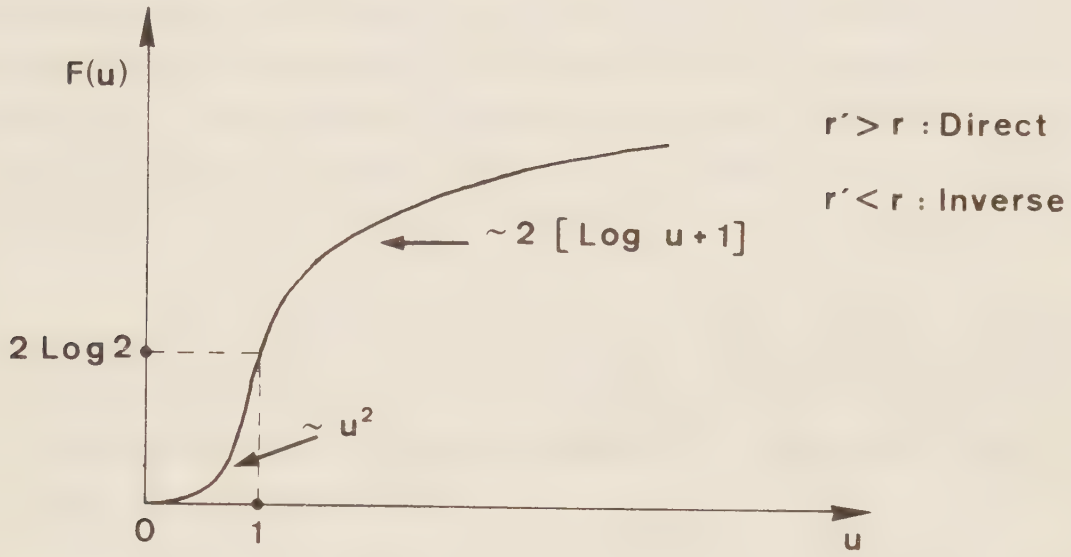
où $\rho_{//} = \frac{=}{2\pi\hbar^2}$ et $r = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (\Delta E - \omega)\right]^{1/2}$

$\Delta E \equiv E_\Gamma - E_L$ pour les transitions intervallées qui nous concernent et $\Delta E = 0$ pour les transitions intravallées.

$$F(u) = (1 + u) \log (1 + u) + (1 - u) \log |1 - u|$$

où $u \equiv \frac{r'}{r}$

La fonction F(u) est toujours positive et possède la forme suivante :



R est donc négatif : l'effet dispersif correspond à un pic de conductance en inverse et à un creux en direct. Les structures réactives présentent le même signe, que les interactions aient lieu dans la barrière ou dans l'électrode. Contrairement aux effets dissipatifs, les effets dispersifs dans les deux régions ne tendent pas à se compenser mutuellement.

Notons enfin que pour les très faibles valeurs de q et q' l'approximation WKB n'est pas réaliste et peut être remplacée par celle de la barrière carrée. La divergence de $D(k_{//},\omega)$ à q = 0 disparaît . Les expressions obtenues alors sont différentes de celles-ci, mais conduisent aux mêmes conclusions concernant le signe des diverses contributions.

B - 2. Calcul avec déphasage

Lorsque la longueur d'onde $\frac{2\pi}{q}$ est inférieure à la distance d - a(q), il apparait nécessaire de tenir compte des déphasages, c'est-a-dire de la variation avec q de l'abscisse du point tournant.

.../...

Cette situation est typiquement celle du n-GaAs et du n-GaSb a pression ambiante. Nous avons en même temps $E_o \gg \mu_F$ et devons tenir compte de la coupure sur $k_{//}$ introduite par le coefficient de transmission. Nous conservons la simplifications d'un vecteur d'onde $q(x)$ indépendant de x et effectuons l'intégrale sur x en utilisant pour borne inférieure la valeur max $[a(q), a'(q')]$.

Nous obtenons ainsi :

$$D(k_{//},\omega) = \int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \frac{A\,B}{qq'} \{P(\frac{1}{2q}) + \frac{\pi}{4} \cos 2\Lambda'_{q,q'} \delta(q-q')\theta(\sigma q-q') - \theta(q'-\sigma q) \frac{\sin 2\Lambda'_{q,q'}}{4} [P(\frac{1}{q+q'}) + P(\frac{1}{q-q'})] + \theta(\sigma q-q') \frac{\sin 2\Lambda'_{q,q'}}{4} [P(\frac{1}{q+q'}) - P(\frac{1}{q-q'})] \} \qquad (B.5)$$

$$R(k_{//},\omega) = -\int \frac{d^2k'_{//}}{(2\pi)^2} \frac{A\,B}{qq'} \{ \frac{1}{4} [P(\frac{1}{q+q'}) + P(\frac{1}{q'-q})] [\theta(q'-\sigma q) \cos 2\Lambda_{q,q'} + \theta(\sigma q - q') \cos 2\Lambda'_{q,q'}] + \frac{\pi}{4} \sin 2\Lambda'_{q,q'} \delta(q-q') \theta(\sigma q - q')\}$$

où $\Lambda_{q,q'}$ et $\Lambda'_{q,q'}$ expriment le déphasage entre $a(q)$ et $a'(q')$:

$$\Lambda_{q,q'} = 2\lambda'^2_o q'^2 [1 - \sigma \frac{q}{q'}] \text{ pour } q' > \sigma q$$

$$\Lambda'_{q,q'} = 2\lambda^2_o q^2 [1 - \frac{1}{\sigma} \frac{q'}{q}] \text{ pour } \sigma q > q'$$

$$\sigma = [\lambda_o/\lambda'_o]^2 \qquad \text{et} \qquad \lambda_o = (\hbar^2 \varepsilon_S / 16\pi m e^2 n)^{1/4}$$

$$\sigma = (\frac{m'}{m})^{1/2}$$

En faisant $\Lambda_{q,q'} = \Lambda'_{q,q'} = 0$, nous retrouvons le modèle précédent.

Les formules ci-dessus sont valables dans un semiconducteur multivallée. Pour les transitions intervallées $\sigma \neq 1$, et les quantités primées se rapportent aux vallées L. Pour les effets intravallées, $\sigma = 1$ mais nous avons toujours $a(q) \neq a'(q')$. Pour le GaSb, $\sigma \sim 2$ et $\lambda_o \sim 5 \times 10^{-7}$ cm. Il s'en suit que $\Lambda_{q,q'}$ et $\Lambda'_{q,q'} < 1$ et l'approximation du modèle précédent est qualitativement correcte dans les configurations permettant d'observer des transitions intervallées.

Dans les cas de plus forte dégénérescence, tels que ceux du GaAs et GaSb à pression ordinaire, le déphasage ne peut plus être négligé et les calculs doivent être poursuivis sur ordinateur en injectant les paramètres qui conviennent à chaque cas particulier.

Sans que nous puissions certifier la généralité de nos résultats, il s'avère que tous les calculs effectués ainsi et correspondant aux conditions expérimentales définies plus haut nous conduisent aux mêmes conclusions qualitatives concernant les interactions qui prennent place dans l'électrode $x > \max(a,a')$:

1) Les termes dissipatifs donnent lieu à des diminutions brusques de conductance à $V = \pm \hbar\omega_o$.

2) Les termes réactifs donnent lieu à un pic (creux) local de conductance en inverse (direct). L'amplitude de ces effet réactifs est assez nettement affaiblie lorsque l'on introduit les déphasages mais le signe ne change pas.

C - ESTIMATION DU POTENTIEL DES IMPURETES PAR PHOTOLUMINESCENCE

L'essentiel de la théorie de la recombinaison radiative dans les semiconducteurs à gap indirect est exposé, par exemple, dans les thèses de O. Parodi[33] et de J. Cernogora[34]. Dans un matériau non dégénéré, tel que celui que C. Benoit à La Guillaume et O. Parodi ont employé, on observe deux raies correspondant à la recombinaison d'un électron lié à une impureté et d'un trou de la bande de valence, soit de façon directe, soit de façon indirecte avec émission de phonon de bord de zone. La transition directe fait intervenir la composante de Fourier $\varphi_o(\vec{k})$ à $\vec{k} \sim 0$ de la fonction d'onde enveloppe f(r) de l'électron lié à l'impureté. O. Parodi montre que l'intensité de la raie directe en nombre de photons par cm^3 de volume émetteur est donnée par :

$$I_d = n_i p_o P_d |\varphi_o(0)|^2$$

où n_i est la densité d'électrons liés aux impuretés, p_o est la densité de trous et P_d est un terme intrinsèque faisant intervenir l'élément de matrice de transition optique. L'intensité de la raie indirecte s'obtient de façon analogue et est donnée par :

$$I_i = n_i p_o P_i(T)$$

où $P_i(T)$ est un terme intrinsèque qui contient l'élément de matrice de transition optique et l'élément de matrice de l'interaction électron-phonon. Le rapport de l'amplitude des deux raies est donné par :

$$\gamma \equiv \frac{I_d}{I_i} = \frac{P_d}{P_i(T)} |\varphi_o(0)|^2$$

Notons que γ est indépendant du nombre d'impuretés dans le cas étudié d'un matériau non dégénéré à basse température.
$P_d / P_i(T)$ peut être déterminé expérimentalement et il s'en suit que la détermination de γ constitue une mesure directe de la composante de Fourier $|\varphi_o(0)|^2$. $\varphi_o(0)$ est proportionnel à f(0), valeur de la fonction d'onde sur le noyau de l'impureté et l'on peut s'attendre à ce que $\varphi_o(0)$ soit relié simplement à la force du potentiel à courte distance.

Dans la théorie de la masse effective qui utilise le potentiel coulombien v_o, le calcul montre que $\varphi_o(0)$ est en fait proportionnel à $v_o(k_o)$ et pour le germanium, O. Parodi obtient $|\varphi_o(0)|^2 \sim 6 \times 10^{-28}$ cm^3.

Nous supposons que, pour le potentiel réel, cette loi de proportionnalité entre $\varphi_o(0)$ et $v(k_o)$ est conservée et la mesure de γ, c'est-à-dire de $|\varphi_o(0)|^2$ nous conduit directement à la force de la composante de Fourier $v^2(k_o)$ recherchée. Les résultats expérimentaux[27] et les valeurs des potentiels sont réunis dans le tableau suivant.

Impureté	γ	$\lvert\varphi_o(0)\rvert^2$ (cm^3)	$v^2(k_o)/v_o^2(k_o)$
Coulombienne	-	6×10^{-28}	1
Sb	< 0.1	6×10^{-27}	< 10
P	5	2.8×10^{-25}	570
As	12	6.6×10^{-25}	1100

Dans les matériaux dégénérés à basse température, les électrons ne sont plus liés aux impuretés et, comme l'a noté J. Cernogora, il faut alors considérer les transitions "directes" comme résultant de la diffusion des électrons de conduction par les impuretés ionisées. Les calculs montrent que la composante de Fourier $v(k_o)$ intervient de la même façon mais que dans ce cas, bien entendu, le rapport des intensités de la raie directe et de la raie indirecte est maintenant proportionnel à la densité d'impuretés dans le cristal. Cette dernière situation est l'analogue de celle que nous étudions dans les diodes p-n tunnel.

REFERENCES

[1] L. Esaki, Phys. Rev. 109, 603 (1957).

[2] F.A. Padovani and R. Stratton, Phys. Rev. Letters, 16, 1202 (1966).

[3] J.W. Conley and G.D. Mahan, Phys. Rev. 161, 681 (1967).

[4] R. Combescot, Thèse de Doctorat d'Etat, Paris (1971).

[5] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozières, and D. Saint-James, J. Phys. C. : Solid St. Phys. 4, 916 (1971).

[6] Voir par exemple, F.A. Padovani dans "Semiconductors and semimetals", R.W. Willardson and A.C. Beer, Academic Press New-York, (1971), volume 7A, chap. 2.

[7] R.H. Fowler, Phys. Rev. 38, 45 (1931).

[8] A. Léger, Thèse de Doctorat d'Etat, Paris (1971).

[9] Voir par exemple "Tunneling phenomena in Solids", (E. Burstein and S. Lundqvist, Plenum Press New York, 1969) chapitre IV.

[10] J.W. Conley, C.B. Duke, G.D. Mahan and J.J. Tiemann, Phys. Rev. 150, 466 (1966).

[11] F.A. Padovani and R. Stratton, Appl. Phys. Letters 13, 167 (1968).

[12] L.C. Davis and F. Steinrisser, Phys. Rev. B 1, 614 (1970).

.../...

[13] P. Guétin et G. Schréder, Phys. Rev. Letters 27, 326 (1971).

[14] R.N. Hall, Proc. Intern. Conf. Semicond. Physics, Prague 1960 Academic Press New York (1961), p. 193.

[15] P. Guétin and G. Schréder, Solid State Comm. 8, 291 (1970).

[16] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozières and D. Saint-James , J. Phys. C : Solid State Phys. 5, 21 (1972).

[17] L. Kleinman, Phys. Rev. 140, A 637 (1965).

[18] Voir par exemple, C.B. Duke "Tunneling in Solids",Solid State Physics, Sup. 10, F. Seitz and D. Turnbull, Academic Press New York,1969, Chap. 21.

[19] L.C. Davis and C.B. Duke, Phys. Rev. 184, 764 (1969).

[20] L.C. Davis, Phys. Rev. B 2, 4943 (1970).

[21] G.D. Mahan and C.B. Duke, Phys. Rev. 149, 705 (1966).

[22] J.A. Appelbaum and W.F. Brinkman, Phys. Rev. B 2, 907 (1970).

[23] L.V. Keldysh, Sov. Phys. JETP 20, 1018 (1965).

[24] C. Caroli, R. Combescot, D. Lederer, P. Nozières and D. Saint-James, J. Phys. C : Solid State Phys. 4, 2598 (1971).

[25] R. Stratton, Phys. Rev. 136, A 837 (1964).

[26] Voir par exemple, W. Kohn dans "Solid State Physics" F. Seitz and D. Turnbull, Academic Press New York (1963), Vol. 5, chap. 4.

[27] C. Benoit à la Guillaume et O. Parodi, Proc. Intern. Conf. Semicond. Physics, Prague 1960, Academic Press, NewYork,(1961) p. 426.

[28] A. J. Bennett, C.B. Duke and S.D Silverstein, Phys. Rev. 176, 966 (1968).

[29] T. Carruthers, J. Applied Physics 41, 3870 (1970).

[30] E.M. Conwell dans "High field transport in semiconductors", Solid State Phys. Suppl. 9, F. Seitz and D. Turnbull, Academic Press New York (1967), chap. III. p. 149.

[31] J.C.P. Miller dans "Handbook of Mathematical Functions", M. Abramowitz and I.A. Stegun, Natl. Bur. Std, Washington D.C. (1964), Appl. Math. Ser. 55, p. 685.

[32] Voir par exemple, A. Messiah "Quantum Mechanics", J. Wiley and sons, inc. - New York (1961), Vol. 1, chap 6.

[33] O. Parodi, thèse de Doctorat d'Etat, Paris (1962).

[34] J. Cernogora, Thèse de Doctorat d'Etat, Paris (1968).

A N N E X E 1

JOURNAL OF APPLIED PHYSICS VOLUME 42, NUMBER 13 DECEMBER 1971

Quantitative Aspects of the Tunneling Resistance in *n*-GaAs Schottky Barriers*

P. Guétin and G. Schréder†
Laboratoires d'Electronique et de Physique Appliquée, 94-Limeil-Brévannes, France
(Received 14 May 1971)

The influence of the doping level and the barrier height on the characteristics of the differential resistance of M/n-GaAs tunnel contacts has been investigated both theoretically and experimentally. The computation has been based on a pure WKBJ approximation and the quadrature over the momentum parallel to the interface was included. The position of the resistance maximum appears strongly dependent on the barrier height and insensitive to the value of the doping level. Vacuum-cleaved contacts have been made with various metals, i.e., barrier heights, for two different values of the carrier density. In spite of some systematic absolute discrepancies, the experimental variations of the differential resistance with the barrier parameters are in good agreement with theory.

I. INTRODUCTION

Since Conley and Mahan[1] succeeded in making tunneling metal/n-GaAs contacts, many authors have published data on the same structure.[2-8] Most of them were interested in interactions of the tunneling electrons with various excitations of both materials. Since the early work[1,2] no special effort has been made to check the consistency of the background resistance with the predictions of simple tunneling models in the case of n-type gallium arsenide.[9]

It is commonly acknowledged that only clean junctions, i.e., vacuum-cleaved samples, should be considered if a semiquantitative agreement between theory and experiments is hoped for. In this respect, the most carefully studied materials have been p-GaAs, n-Ge, p-Si,[10] where the resistance maximum occurs at, or very near, a voltage V_{max} corresponding to the Fermi degeneracy μ_F. Conley and Mahan have shown[1] that in the particular case of germanium, the over-all shape and the maximum of the differential resistance do not depend much on the tunneling model. However, n-GaAs appears as a more general case where a two-band model is required and where V_{max} cannot be predicted accurately in a simple manner.

In this work, we have attempted to acquire, for this general case, a better understanding of the tunnel characteristics and essentially of their dependence on the parameters of the junctions. Incentive for this study was given by other experiments of tunneling under hydrostatic pressure[11,12] and in ion-bombarded contacts.[13] Since sophisticated theoretical approaches become quickly untractable, we have kept our model as straightforward and consistent as possible. The results of the computation are compared to the characteristics of vacuum-cleaved M/n-GaAs contacts without using any adjustable parameter. We are mainly concerned with the resistance at rather low bias (±100 mV) where most interesting features of tunneling show up. Although the absolute value of the resistance is somewhat discussed, we give more emphasis to the shape of the background and especially to the position of the resistance maximum.

In Sec. II we recall Conley and Mahan's model and outline our theoretical approach. Section III is devoted to the results of the calculation. Section IV presents the experimental details and results. Tunnel results are reported in Sec. V and some comments on their agreement with theory appear in Sec. VI.

II. THEORETICAL MODEL

Since the method of Conley, Duke, Mahan, and Tiemann (CDMT)[14] cannot be applied to the case of n-GaAs for a variety of potentials, Conley and Mahan have used a WKBJ approximation together with an extra $E^{1/2}$ prefactor. This somewhat arbitrary procedure has been discussed by several authors.[15] The quadrature over the momentum parallel to the interface ($k_\parallel$) was not carried out. In other words, only electrons normal to the plane of the junction were taken into account. Various forms of the electron dispersion relation in the gap and of the average barrier potential were considered.

In their discussion of Schottky-barrier tunneling, Conley and Mahan classified junction behaviors in terms of two ratios μ_F/E_0 and V_b/E_g, where

$$E_0 = (e^2 N \hbar^2/4m^*\epsilon)^{1/2}.$$

E_g, V_b, and N stand,[16] respectively, for the energy gap, the barrier height, and the doping level. E_0 is a parameter of the material expressing roughly the energy spread of the electrons which contribute most to the tunneling current. If $\mu_F < E_0$, electrons near the conduction band edge and electrons at the Fermi level have nearly the same transmission coefficient. The fact that tunneling electrons "see" the band edge results in a more or less accurate pinning of the resistance maximum at $V \sim \mu_F$. This interesting feature is well accounted for by theory and appears rather independent of the choice of the barrier potential. When $\mu_F > E_0$, however, one can

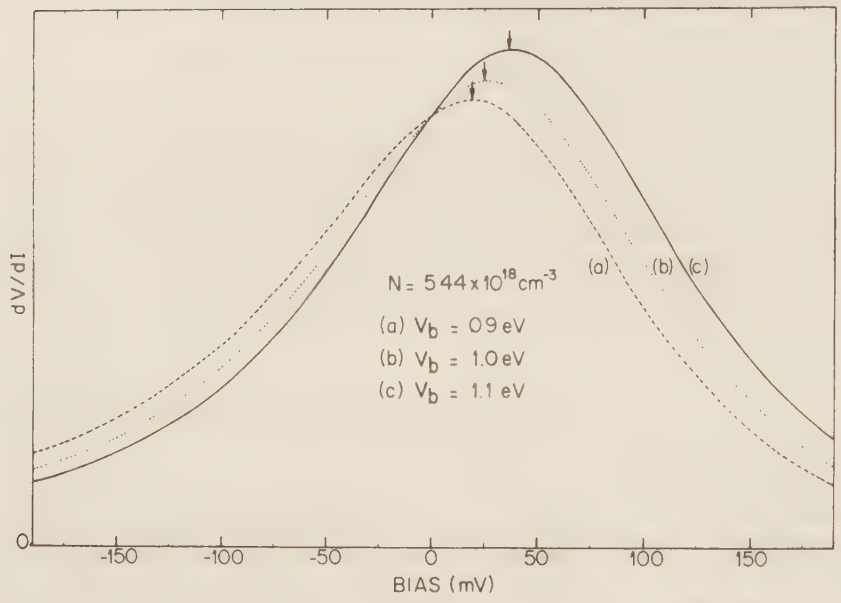


FIG. 1. Theoretical differential resistance vs bias voltage illustrating the dependence of the background on the barrier height.

consider that the relevant tunneling electrons will not "see" the conduction band edge and therefore one cannot expect the resistance maximum to be located at $V \sim \mu_F$. This is the case with n-GaAs. In a one-band dispersion model, the same authors predict a smooth resistance maximum at zero bias. Such a parabolic dispersion relation is justified when $V_b \ll E_g/2$, i.e., when electrons remain near the conduction band during the tunneling process. The barrier height however is larger than $E_g/2$ in n-GaAs and one has to take into account the mixing of conduction and valence band states. Conley and Mahan found that introducing a two-band model shifts the resistance maximum towards forward[16] bias. Within a multiplicative constant, their results obtained with a parabolic potential $V_p'(z)$[1] fit the experimental curves at reverse bias but the agreement at forward bias is poor. Only one metal (gold) was used in their study. In disagreement with their experimental findings, their computation predicts that the position of the resistance maximum depends quite strongly on the doping level. Our theoretical work has been aimed at defining the parameters which influence the over-all resistance shape.

We assume a homogeneous semiconductor and a perfect interface between both materials together with specular transmission. The differential resistance is computed in a straight WKBJ approximation (no extra prefactor) with a parabolic barrier and a Franz two-band model. We use Conley and Mahan's parabolic potential $V_p'(z)$, i.e., disregarding the influence of free carriers. This potential provides a slightly thinner barrier than the "exact" solution of the Poisson equation. The main improvements on these authors' approach consist in dropping altogether the controversial $E^{1/2}$ prefactor and carrying out the quadrature over the parallel momentum ($k_\parallel$). The necessity of the latter operation at low bias can be illustrated by the following example. At a given bias V, an electron of total energy $E = \mu_F$ with $\hbar^2 k_\parallel^2 / 2m^* = V$ contributes to the current exactly as much as an electron of total energy $E = \mu_F - V$ with $k_\parallel = 0$.

The 0 °K resistance can be written as

$$R(V) \equiv \left(\frac{dI}{dV}\right)^{-1},$$

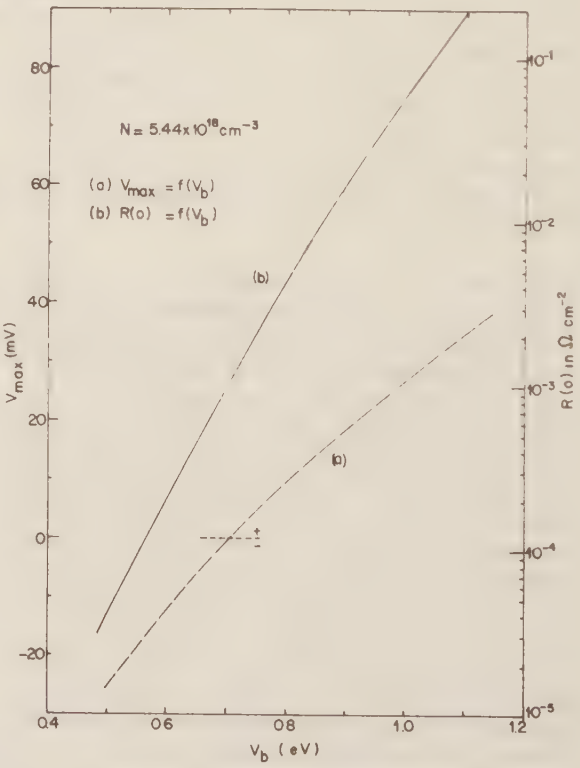


FIG. 2. Theoretical dependence on the barrier height of (a) the resistance maximum V_{max} and (b) the zero-bias resistance $R(0)$.

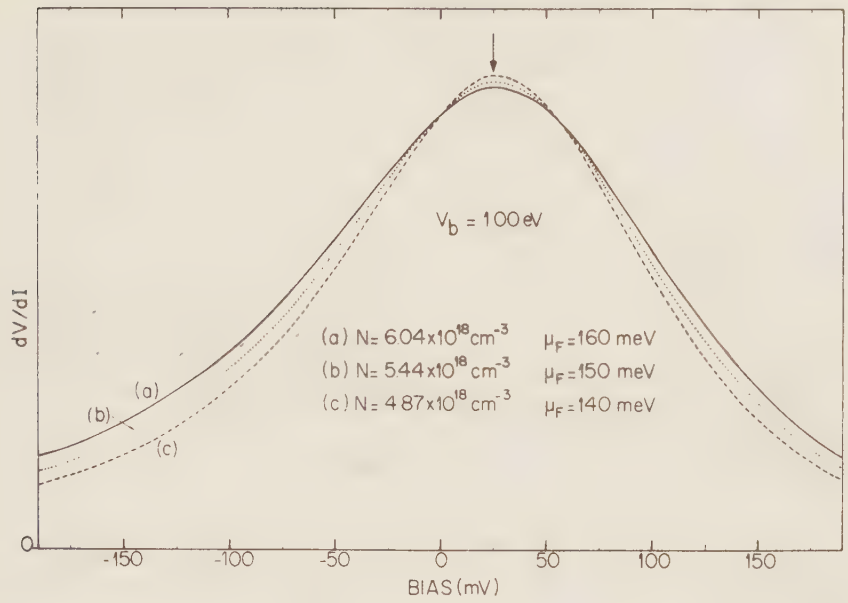


FIG. 3. Theoretical differential resistance vs bias voltage illustrating the dependence of the background on the doping level.

where

$$I(V)=\frac{2eA\rho_{\parallel}}{h}\int_{k}^{\mu_F} dE \int_{0}^{E} dE_{\parallel}\, D(E_{\parallel},\ E,\ V)$$

and

$$K=\begin{cases}\mu_F - V & \text{for } V<\mu_F\\ 0 & \text{for } V\geq\mu_F.\end{cases}$$

V stands for the energy corresponding to the applied bias. E and $E_{\parallel}$ are, respectively, the total energy and the kinetic energy related to the motion parallel to the junction plane, both measured from the bottom of the conduction band. A is the contact area and

$$\rho_{\parallel}=m^*/2\pi\hbar^2.$$

μ_F is the Fermi degeneracy measured from the "ideal" band edge. $D(E_{\parallel},\ E,\ V)$ is the WKBJ transmission coefficient:

$$D(E_{\parallel},\ E,\ V)=\exp\left(-2\int_{z_1}^{z_2} k(z)\,dz\right)\equiv D(E-E_{\parallel},\ V).$$

D is computed using Conley and Mahan's expression for the Franz two-band model[1] in which the total electron energy is replaced by the energy associated with the motion perpendicular to the junction $E-E_{\parallel}$. The parameters chosen in the computation have the following values: Fermi degeneracy μ_F = free-electron model corrected for nonparabolicity[17]; energy gap (0 °K) $E_g=1.522$ eV; relative static dielectric constant $\epsilon=12.5$; effective mass (band edge) $m^*=0.07m_0$; measured values are used for V_b, N, and A. The computation is therefore done *without any adjustable parameter*. 50 sec of computing time on an IBM 360/40 are needed to obtain one resistance curve on the ±200-mV range. For clarity purposes, we present graphs where *all the curves have been normalized at* $V=0$ and the corresponding "normalized" resistance is written $R_N(V)$.

Before showing a few plots giving some insight into the influence of the various parameters, we wish to briefly discuss the chosen model. Padovani and Stratton[18] have shown that as soon as the electron energy becomes a few millivolts higher than the bottom of the conduction band, the CDMT and the WKBJ transmission coefficients are very nearly proportional. Since the latter is typically a few percent of that at the Fermi level of the injecting electrode, we feel that WKBJ should represent a decent approximation. Image force effects have been

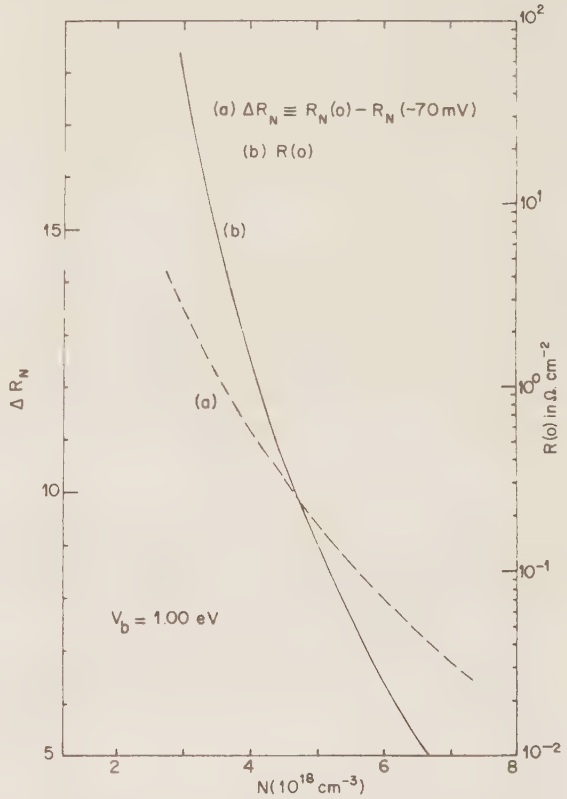


FIG. 4. Theoretical dependence on the doping level of (a) the "curvature" parameter ΔR_N, (b) the zero-bias resistance $R(0)$.

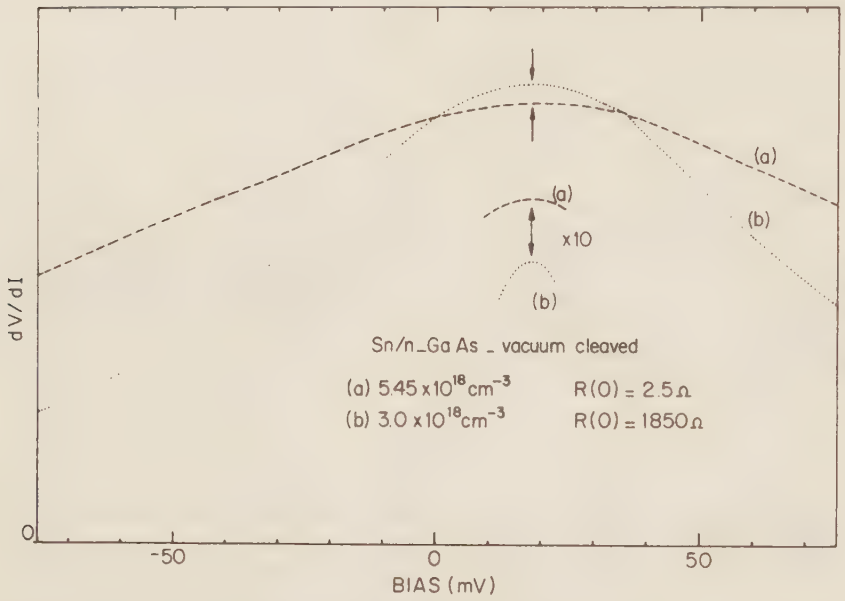


FIG. 5. Differential resistance vs bias voltage of vacuum-cleaved Sn/*n*-GaAs contacts for two different doping levels. Local magnification of both resistance peaks is presented.

neglected. They seem, however, to result in corrections to the tunnel current which are small and independent of voltage.[1] The neglect of potential fluctuations and the choice of a parabolic barrier probably constitute more debatable approximations which will be further discussed in Sec. VI. Moreover, it is well known that for the high doping levels (5×10^{18} cm^{-3}) considered here, the impurity band merges with the conduction band and the image of a sharp band edge is most questionable. The electrons located in the impurity band can be expected to contribute somewhat to the tunnel conductance and also to modify the dispersion relation in the energy gap. A more complete treatment of the last effects, however, is beyond our scope at the present time.

III. THEORETICAL RESULTS

The computation has been limited to the ±200-mV range with emphasis on the shape at low bias (±50 mV). We can expect, however, that the importance of inelastic tunneling increases with bias and self-energy effects may also modify the resistance above 36 mV (LO phonon) in a nonnegligible way.

A. Influence of Barrier Height

Figure 1 shows the differential resistance for three barrier heights and a given doping level. The main effect can be pictured as an over-all shift of the curve towards higher forward bias. The curves cross at $V=0$ (normalization) and the position of the resistance maximum V_{max} increases with the barrier height V_b. One can "measure" the sensitivity of V_{max} with V_b by

$$\frac{dV_{max}}{V_{max}} \Big/ \frac{dV_b}{V_b} \simeq 3.$$

Curves (a) and (b) plotted on Fig. 2 illustrate, respectively, the dependence of V_{max} and $R(0)$ on V_b.

For very low barriers ($V_b \lesssim E_g/2$), V_{max} becomes negative: The band mixing still influences the background resistance through the $k_\parallel$ integration. In other words, when $\mu_F > E_0$ a two-band model is necessary even when $V_b < E_g/2$. Unfortunately, we have been unable to check this theoretical result on *n*-GaAs since the lowest barrier height obtained in the present experiments on vacuum-cleaved contacts was 0.83 eV at 77 °K. Curve (b) shows the variation of the zero-bias resistance $R(0)$ with V_b on a semilog scale. $R(0)$ increases nearly exponentially with V_b as expected from an approximate model[2]:

$$R(0) \sim Be^{V_b/E_0}.$$

The slope of curve (b) yields values for E_0 only 10% smaller than the computed expression.

B. Influence of Doping Level

The three curves in Fig. 3 have been computed for the same barrier height and three different doping levels N together with the corresponding degeneracy μ_F. All curves cross twice and the shift of V_{max} is negligible:

$$\frac{dV_{max}}{V_{max}} \Big/ \frac{dN}{N} \lesssim 0.1.$$

The main effect is an increase of the over-all "curvature" $|dR_N/dV|$ when N decreases. This is not surprising since the structure tends to look like a metal-insulator-metal structure when the doping becomes higher (the barrier becomes relatively higher and thinner). The most interesting feature of course is the following: *The resistance maximum does not depend appreciably on the N value.* Instead of computing $|dR_N/dV|$ at a given voltage from the experimental and theoretical results, it has appeared more convenient to use a simpler quantity approximating fairly well the above defined "curvature" at reverse bias: $\Delta R_N \equiv R_N(0) - R_N(-70\text{ mV})$. Curves (a)

TABLE I. Barrier heights of M/n-GaAs contacts measured by the capacitance C-V and the photothreshold methods φ. The reported error corresponds to the maximum experimental dispersion.

Metal	T (°K)	V_b (eV) C-V	φ
In (Ref. 4) (ac)	300	...	...
	77	0.80 ± 0.05	...
	4	$0.81_c \pm 0.05$	...
Sn (vc)	300	$0.77_5 \pm 0.02$	0.79 ± 0.01
	77	$0.82_5 \pm 0.02$	...
	4	$0.83_{5c} \pm 0.02$	$0.88_c \pm 0.01$
Pb (vc)	300	0.83 ± 0.02	$0.84_5 \pm 0.01$
	77	0.90 ± 0.02	...
	4	$0.91_c \pm 0.02$	$0.93_{5c} \pm 0.01$
In (vc)	300	$0.91_5 \pm 0.02$	$0.91_5 \pm 0.01$
	77	$0.98_5 \pm 0.02$	...
	4	$0.99_{5c} \pm 0.02$	$1.00_{5c} \pm 0.01$
In (Ref. 4) (vc)	300	...	...
	77	1.05 ± 0.05	...
	4	$1.06_c \pm 0.05$	...
Au (vc)	300	$0.94_5 \pm 0.02$	...
	77	1.01 ± 0.02	...
	4	$1.02_c \pm 0.02$	...

and (b) of Fig. 4 illustrate quantitatively the dependence of ΔR_N and $R(0)$ on the doping level.

From diode to diode, N can be expected to vary by 10%. Apart from a change of the over-all "curvature" and of the resistance by a factor of 2, this variation should not give any noticeable fluctuation of V_{max}.

N and V_b are the only parameters that we expect to possibly vary from diode to diode. Their respective influences can be well separated and this interesting fact should allow us to test the validity of the model on a relative basis.

However, in order to test the sensitivity of the background shape with the other parameters and to acquire more confidence in the validity of a possible agreement with our theory, we quickly note some results on their variation. ϵ has been changed from 12 to 13 with a resulting $\Delta V_{max} < 1$ mV. Therefore a precise value of ϵ is of no interest to us. The effective mass m^* (and μ_F) has been varied from $0.065m_0$ to $0.076m_0$. These values correspond to the extremes found in the literature for n-GaAs. Although the "curvature" increases as the tunneling mass is lowered, the position of the resistance maximum is changed by less than 3 mV. This allows us to conclude that, for given barrier and two-band models, the barrier height is by far the parameter which contributes most in fixing V_{max}. In principle, the position of the resistance maximum should allow us to determine V_b without regard to the value of N. The "curvature", on the other hand, does not directly lead to the doping level since it is not independent of the value of the barrier height.

IV. EXPERIMENTAL DETAILS

A. Sample Preparation

Tunnel contacts have been made by vacuum (or air) cleaving a (110) bar of GaAs in the stream of the evaporating metal. Prior to evaporation, the boat or filament was outgassed for a couple of hours at 10^{-9} Torr and subsequently the pressure was brought below 5×10^{-10} Torr. The evaporation was then started and after a few minutes the bar was cleaved. During evaporation, the residual pressure outside of the stream did not exceed 5×10^{-9} Torr. A mask was placed in front of the cleaved surface immediately after cleavage and the evaporation rate was higher than 500 Å/m. On each cleaved surface 16 diodes were fabricated and at least five of them were selected on the best surface portions. These junctions were subsequently contacted by bonding a thin silver wire with a droplet of silver paste. The back contact was secured by evaporating a Ge-Sn alloy on the side of the bar and heating it up to 300 °C before insertion in the vacuum system.

We determined the doping level by Hall effect experiments at 77 and 4.2 °K.

B. Barrier-Height Measurements

The barrier heights were measured on junctions prepared in the same way on a less-doped material ($n = 5.35\times10^{17}$ cm^{-3}-Te) by two methods: differential capacitance (C-V) at 300 and 77 °K and photothreshold measurement (φ) at 300 °K. Capacitance measurements were done with an indium tip contact on a 75A-S8 Boonton bridge. All junctions provided linear $1/C^2$-V plots on the whole voltage range where their resistance was inferior to 1 kΩ, and the high-frequency modulation was checked to be small enough not to lead to a systematic error on the value of the intercept V_0 with the voltage axis. The barrier height was deduced from the intercept and corrected for the Fermi-level position and the majority-carrier contribution. At 77 °K, for example, $V_b = V_0 - \frac{3}{5}\mu_F$. Table I presents our results and the extrapolated values of V_b at 4 °K ($\Delta V_b \sim \Delta E_g$).

TABLE II. Theoretical and experimental position of the resistance maximum V_{max} for different metals. The third column gives the "measured" barrier heights taken from Table I and the last column gives the values which would yield a fit of the resistance maximum.

No.	Metal	V_b (eV) C-V (4°K)	V_{max} (mV) theor	V_{max} (mV) expt	V_b (eV) tunnel
1	In (Ref.4) (ac)	0.81 ± 0.05	11.0 ± 4	20 ± 2	0.92 ± 0.02
2	Sn (vc)	$0.83_5 \pm 0.02$	14.0 ± 2	18 ± 1	0.90 ± 0.01
3	Pb (vc)	0.91 ± 0.02	19.5 ± 2	28 ± 1	1.02 ± 0.01
4	In (vc)	$0.99_5 \pm 0.02$	26.5 ± 2	33 ± 1	1.08 ± 0.01
5	In (Ref. 4) (vc)	1.06 ± 0.05	31.5 ± 4	36 ± 2	1.12 ± 0.02
6	Au (vc)	1.02 ± 0.02	28.0 ± 2	36 ± 1	1.12 ± 0.01

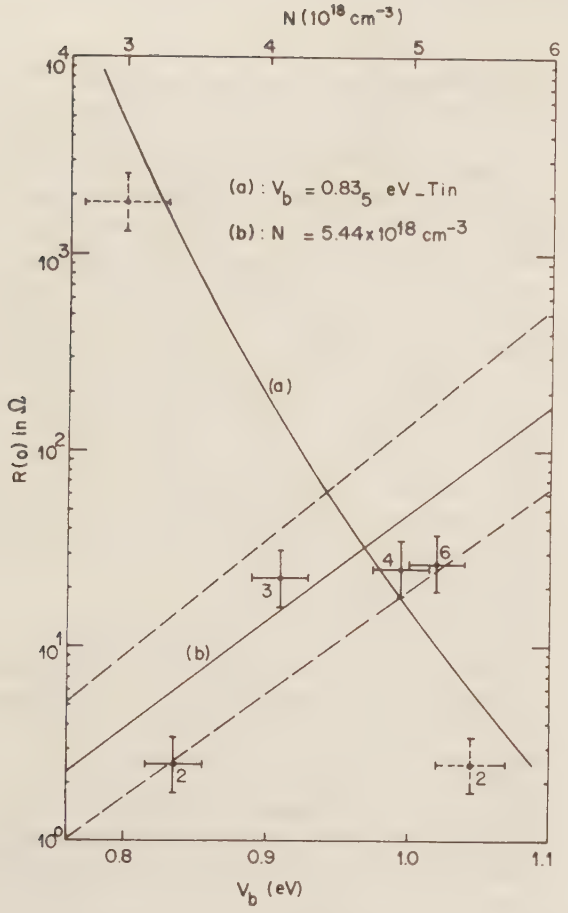


FIG. 6. Quantitative comparison between theory and experiments. Curve (a) illustrates the dependence of $R(0)$ on the doping level for tin contacts and the corresponding experimental data are plotted with broken error bars. Curve (b) illustrates the dependence of $R(0)$ on the barrier height for different metals. The corresponding experimental data are plotted with solid error bars together with their identification number figuring in Table II. No adjustable parameter is used.

Photothreshold measurements were also carried out at 300 °K on the capacitance samples in order to check the consistency of the capacitance measurements and to obtain a better accuracy on the relative variations of the barrier height from diode to diode. These experiments were carried out with a double-pass spectrometer by shining light from the semiconductor side (cleaved surface also) in order to allow the use of rather thick metal films. Very thin films ($\lesssim 200$ Å) were purposely avoided since they have a tendency to be discontinuous. A pollution of the interface when the diode is brought into the atmosphere and subsequently contacted would most likely occur. This is also the reason why these measurements were not carried out on the tunnel samples themselves since the very high absorption makes back shining impossible. Moreover, even on the less-doped material ($n = 5.35 \times 10^{17}$ cm^{-3}), the determination of the absolute value of the static barrier height involves a large correction in order to allow for image force lowering and tunneling through the top of the barrier. Photothreshold measurements have been corrected to take into account the fraction of photons actually reaching the interface for each wavelength. The resulting correction remains small ($\lesssim 20$ meV). The results given in the fourth column of Table I have been further tentatively corrected for image force lowering and tunnel contribution according to Archer and Yep[19]:

$$V_b(\varphi) = h\nu_0 + \Delta\phi_{i,t},$$

$$\Delta\phi_{i,t} \sim 1.3\Delta\phi_i,$$

where $h\nu_0$ is the intercept of the square root of the response per photon, $\Delta\phi_{i,t}$ is the total threshold lowering, and $\Delta\phi_i$ is the image force lowering. $\Delta\phi_i$ can be estimated at 70 meV for the material used throughout this work so that $\Delta\phi_{i,t} \simeq 90$ meV. This is understood to be quite rough, but we recall that the photothreshold method is considered here *only* as an *accurate relative* measurement. The value at 4 °K is calculated from the 300 °K value by adding $\Delta E_g \simeq 90$ meV (gap change). In Table I, vc stands for vacuum cleaved, ac for air cleaved, and the index c refers to extrapolated values.

These results can be compared to Spitzer and Mead's values,[20] for example. Unlike these authors, however, we have not observed any noticeable evolution of lead junctions even after a few thermal cycles and a couple of weeks of aging. Within the experimental dispersion, our results are in good agreement with those reported by Spitzer and Mead for gold contacts but not for tin junctions. On the latter material, our measurements on vacuum-cleaved contacts yielded a barrier height about 100 meV larger than theirs. Better vacuum conditions in the present experiments might be responsible for this discrepancy. It is worth noticing that some metals provide barrier heights which depend strongly on the chemical cleanliness of the interface, as illustrated by the case of indium.

For a particular cleavage, the spread between extreme values of the barrier heights (ΔV_b) is very small for all metals and seems to be mainly determined by the accuracy of the measurement method. The observed spread is

$$\Delta V_b(C-V) \leq 20 \text{ meV},$$

$$\Delta V_b(\varphi) \leq 10\text{–}20 \text{ meV} \text{ depending on the metal.}$$

This means that, on a particular cleavage again, the actual barrier height should not vary by more than 1 to 2% from diode to diode. According to Sec. III A one can therefore expect that the total variation ΔV_{max} due to barrier-height fluctuations alone should not exceed 2–6%, i.e., ~1–2 mV.

For different cleavages, the situtation is not as clear since only a few samples have been cleaved for each metal. For all metals reported here, however, the

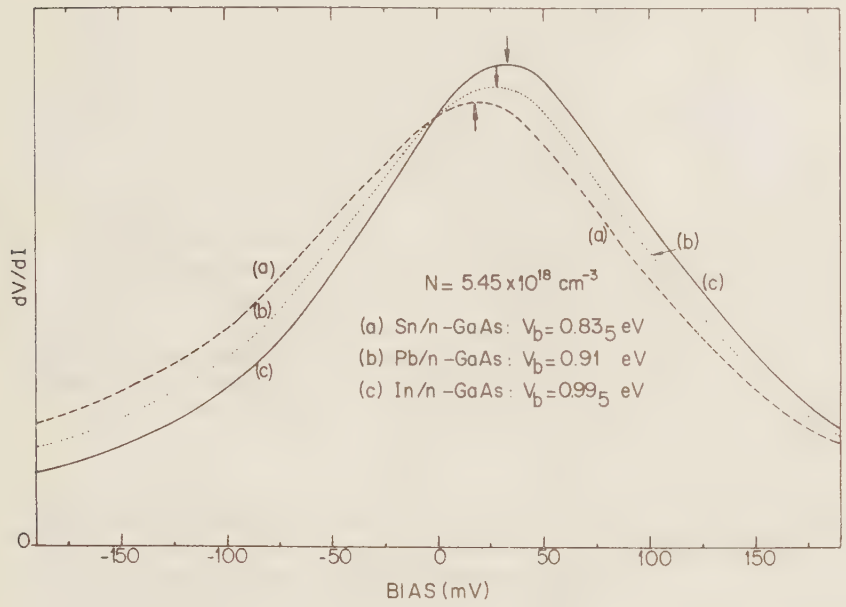


FIG. 7. Differential resistance vs bias voltage of vacuum-cleaved metal/*n*-GaAs contacts for different counter electrodes. The measured barrier heights figure in the insert.

total spread ΔV_b never exceeded 40 meV. We therefore have reported barrier-height values with an accuracy of ±20 meV.

V. TUNNEL MEASUREMENTS

A. General

Tunnel measurements consisted in recording the differential resistance dV/dI and the conductance derivative d^2I/dV^2 at 4.2 °K by using standard derivative techniques. Whenever possible the good quality of the tunnel contacts was checked by looking at the superconducting density of states of the metal, and when not possible the amplitude and position of the GaAs LO phonon structure was used for the same purpose.

Generally speaking, the reproducibility of vacuum-cleaved tunnel contacts was excellent regarding the absolute resistance, the background shape, and the position of the resistance maximum. For a definite metal, the extreme values of the absolute resistance differ by a factor of ~2, i.e., ±30% about the mean value. Figure 4 shows that this spread corresponds to a total variation of the doping level of 10% which seems unavoidable and constitutes the main source of resistance fluctuations. Barrier-height fluctuations have a comparatively negligible effect. The reproducibility of the absolute impedance appears limited by the homogeneity of the material.

The shape of the resistance curve also is very reproducible and the slightly variable over-all "curvature" can be again accounted for by a 10% spatial

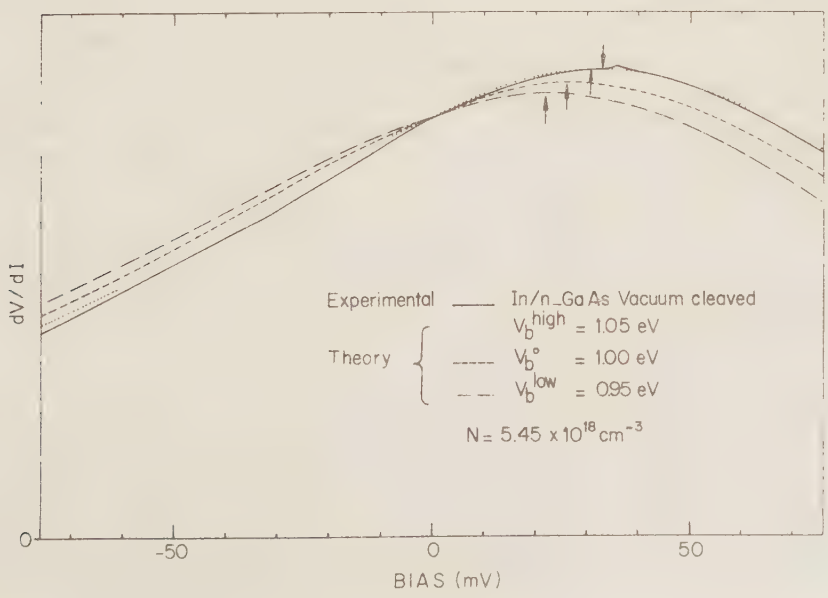


FIG. 8. Differential resistance vs bias voltage of vacuum-cleaved In/*n*-GaAs contacts (full line) together with three computed resistance curves corresponding to slightly different barrier heights.

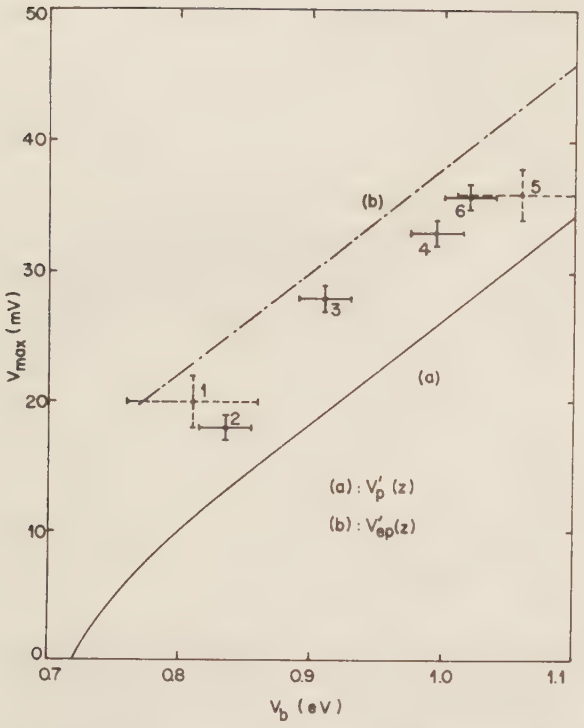


FIG. 9. Plot of the position of the resistance maximum V_{max} vs barrier height V_b. The full line and the dash-dotted line correspond to the theory for a purely parabolic barrier (a) and for a parabolic-exponential potential (b), respectively. Our experimental results are presented with full error bars and the ones of Duke *et al.* with dashed error bars.

change of the doping level. The position of the resistance maximum for all diodes made on the same cleavage plane is always very well defined and does not change by more than 6%. Therefore the results (Table II) will be given at ± 1 mV. This agrees very well with the above discussion and confirms that, on a particular cleavage, all contacts have the same height within ± 10 meV. For different cleavages and the same metal, the average V_{max} does not change by more than 1 mV.

For the following, we will be mainly interested in the background shape although the absolute value of the resistance and its variation with either N or V_b will be somewhat discussed.

B. Influence of Doping Level

This study was made with two materials doped with tellurium at 5.45×10^{18} and $(2.7-3.4)\times10^{18}$ cm^{-3}. Figure 5 shows the differential resistance of vacuum-cleaved samples made on both materials with a tin counterelectrode. Within the experimental dispersion (± 1 mV), the position of the resistance maximum is the same for both curves in complete agreement with theory. The measured values of the "curvature" are regularly found 5—10% larger than predicted by a computation which uses the measured barrier height. This discrepancy is related to the fact that the computed resistance curve appears always displaced towards the left of the experimental one as will be discussed below. Finally, we find that the numerical value of the zero-bias reistance $R(0)$ presents a variation with the doping level which is also in good agreement with the above model. This latter point is illustrated by curve (a) in Fig. 6 in which the solid curve has been computed for the measured barrier height and diode area. The experimental points sit below the solid curve and quite generally one can say that theory predicts resistance values which are typically too large by a factor of 2. In spite of this small systematic discrepancy, the quantitative agreement is quite satisfactory.

C. Influence of Barrier Height

In order to check whether the theory predicts the right dependence on the barrier height, i.e., whether or not tunnel contacts may be used as a measure of this parameter, we have changed its value by using various metals. Extreme values at 77 °K are, respectively, 0.83 eV for tin and 1.02 eV for gold contacts. We expect to change only the barrier height by changing the metal, at least on vacuum-cleaved samples where it should be possible to obtain oxide-free interfaces. The high reproducibility suggests that the conditions for nearly ideal contacts are met.

Curve (b) in Fig. 6 illustrates the dependence of $R(0)$ on V_b for a single doping level. The solid line has been computed for the measured doping level N and diode area and the two broken lines correspond to doping levels 10% larger and 10% smaller than N. Apart from lead which leads to junctions slightly more resistive than expected, all the other metals provide contacts having a resistance smaller than predicted by the computation. Again the quantitative agreement is quite satisfactory.

Before giving quantitative results in Table II, we wish to present a few typical situations. Figure 7 shows the resistance curves for three different metals with barrier heights differing by approximately 10%. This set of curves compares well with the computed one presented in Fig. 1. Figure 8 shows on an expanded scale a typical experimental situation (vacuum-cleaved/indium) and the corresponding computed curve (b) for the measured barrier height V_b. We have also plotted on the same drawing the computation corresponding to $V_b^{low} \equiv V_b - 50$ meV (a), and $V_b^{high} \equiv V_b + 50$ meV (c). Arrows mark the position of the resistance maximum V_{max}. In this particular case, the values of V_{max} are, respectively, experiment: 33 ± 1 mV; V_b^{low}(0.95 eV): 23.5 mV; V_b(1.00 eV); 26.5 mV; V_b^{high}(1.05 eV): 32 mV. The experimental and theoretical (b) curves cross only once at $V=0$ and the agreement is poorest at forward bias ($V>0$). On the other hand, the agreement with curve (c) computed for V_b^{high} is excellent and this is true most of the time for all

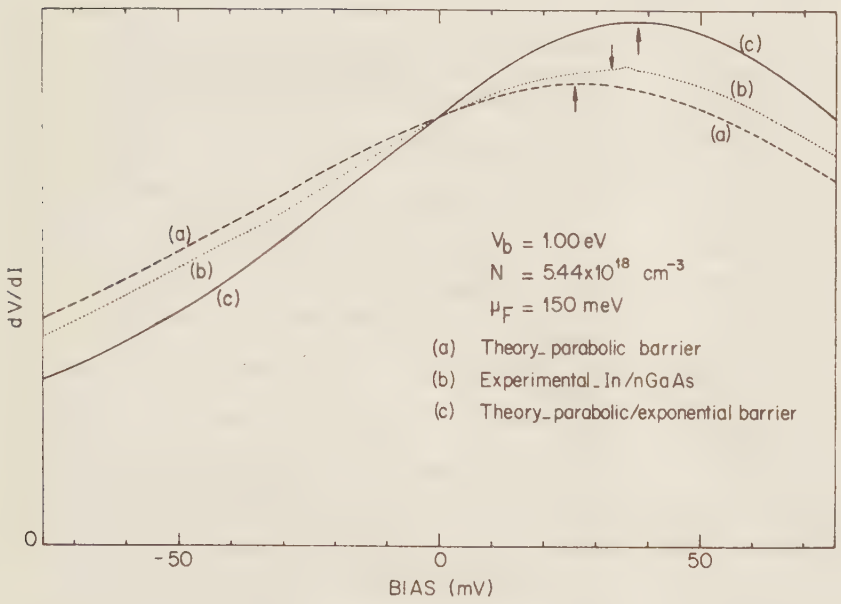


FIG. 10. Differential resistance vs bias voltage of a vacuum-cleaved In/n-GaAs contact together with the corresponding computed curves for both theoretical models of the barrier potential.

metals used in this work. The fit with the V_b^{high} curve is still very good on the ±200-mV scale. The main discrepancy comes from a lower experimental "curvature" at high voltages of both signs.

Our main results concerning the resistance shape are summarized more quantitatively in Table II for a single doping level: $n = 5.45 \times 10^{18}$ cm^{-3} (Te). Two results reported by Duke *et al.*[4] have been included. The third column is devoted to the values of the barrier heights at 4 °K taken from Table I. The C-V value of the barrier height is taken as the true static barrier height to enter into the computation. In the fourth column, we give $V_{\max}$ computed for this measured barrier height and in the fifth one we report the experimental $V_{\max}$. In the last one we figure the V_b values which would lead to a fit of the $V_{\max}$. The computed $V_{\max}$ is provided with the uncertainty corresponding to the accuracy of the barrier-height measurement that we discussed above.

The results of Table II are illustrated by Fig. 9 on which clearly appears a systematic discrepancy between theory and experiments regarding the position of the resistance maximum. On the average, the experimental $V_{\max}$ is found 7 mV too low. We can say, in other words, that the barrier height "determined" by tunnel effect is about 90 meV larger than the actual value. On the other hand, the rate of change of $V_{\max}$ with V_b is predicted quite accurately by the theoretical model [Fig. 9, curve (a)].

VI. DISCUSSION AND CONCLUSIONS

Although the general agreement between the experiments and the predictions of our simplified theoretical model is fair, we have observed systematic quantitative discrepancies for the value of the resistance, the value of the "curvature", and the position of the resistance maximum. According to our discussion of Sec. III B, the choice of the barrier and material parameters cannot be responsible for the observed anomalies. The validity of the theoretical model can be further discussed in light of the experiments. Clearly, the approximations are too rough. As we mentioned in Sec. II, using a WKBJ transmission coefficient[18] and neglecting image force effects[1] are unlikely to greatly alter the shape of the differential resistance. The latter phenomenon tends to decrease the value of the resistance only by a small amount. The WKBJ approximation, on the other hand, has been shown by Padovani and Stratton[18] to lead to an underestimation of the transmission probability by a factor of 2 in comparison with the "exact" CDMT solution for a given potential. Correcting our computed results by this factor would greatly improve the agreement for the value of the zero-bias resistance. The influence of potential fluctuations, band tailing, and specular tunneling is not clear at present. The discussion of these effects is beyond our scope and its relevance may be somewhat questioned since the resistance shape appears very dependent on the form of the average potential. As an attempt towards reducing the observed discrepancies, we have carried out a completely analogous computation of the tunnel conductance using now a better approximation for the shape of the barrier: the exponential-parabolic (ep) form[1] $V_{\text{ep}}(z)$. Conley and Mahan have shown that this particular form approximates very closely the exact solution[1] of the Poisson equation in the presence of free carriers. For given barrier height and doping level, the ep potential yields a wider barrier than $V_p'(z)$ does and the resulting zero-bias resistance consequently increases by a factor of 3.

Figure 10 compares the results obtained in both barrier models for the same set of parameters. Curve (b) illustrates the experimental situation. Clearly, changing slightly the form of the potential

modifies quickly the resistance shape. Figure 9, curve (b) shows that, with respect to $V'_p(z)$, the ep potential predicts a similar dependence of V_{max} on V_b but leads to a systematic disagreement with experiment of the opposite sign. Using the (quasi) "exact" potential does not therefore improve the agreement with the experimental results. Again, the discrepancies cannot be accounted for by the uncertainties on the barrier parameters and it appears that the *effective* average potential is intermediate between $V'_p(z)$ and $V_{ep}(z)$. Since no clear picture of the influence of fluctuations and band-tail states is available at present, we will not discuss further the "absolute" agreement between theoretical and experimental resistance shapes. On the other hand, this work shows that the straight parabolic potential $V'_p(z)$ provides very good results concerning the relative variations of the value and shape of the resistance when the doping level and the barrier height are varied. The effects of both parameters are easily separated and their values can therefore be deduced within 5—10% from the tunnel measurements. This simple model allows quantitative predictions and will therefore be used confidently in the interpretation of tunneling under other physical conditions.[12]

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank Professor E. Guyon for his constant interest in this work. Miss M. Nelson-Pautier and R. Duchesne are gratefully acknowledged for their skillful technical assistance.

*Work supported by the Direction des Recherches et Moyens d'Essais.

†Work based in part on a Docteur-es-Sciences thesis to be presented at the University of Paris, 1971/1972.

[1]J.W. Conley and G.D. Mahan, Phys. Rev. 161, 681 (1967).

[2]R. Stratton and F.A. Padovani, Solid State Electron. 10, 813 (1967).

[3]D.C. Tsui, Phys. Rev. Letters 22, 293 (1969).

[4]C.B. Duke, M.J. Rice, and F. Steinrisser, Phys. Rev. 181, 733 (1969).

[5]M.F. Millea, M. McColl, and C.A. Mead, Phys. Rev. 177, 1164 (1969).

[6]P. Thomas and H.J. Queisser, Phys. Rev. 175, 983 (1968).

[7]M. Mikkor and W.C. Vassell, Phys. Rev. B 2, 1875 (1970).

[8]P. Guétin and G. Schréder, Solid State Commun. 8, 291 (1970).

[9]The paper of Millea *et al.* does not discuss the low-bias (± 100 mV) differential resistance but provides comprehensive results at higher bias.

[10]See, for example, C.B. Duke, *Tunneling in Solids* (Academic, New York, 1969), p. 102.

[11]P. Guétin and G. Schréder, Solid State Commun. 9 591 (1971).

[12]P. Guétin and G. Schréder, Phys. Rev. Letters 27, 326 (1971).

[13]P. Guétin and G. Schréder, J. Appl. Phys. (to be published).

[14]See Ref. 10, p. 75.

[15]J.W. Conley, C.B. Duke, G.D. Mahan, and J.J. Tiemann, Phys. Rev. 150, 466 (1966).

[16]Throughout this entire work, forward bias ($V>0$) corresponds to electron injection from the semiconductor into the metal and conversely for backward or reverse bias ($V<0$).

[17]H. Ehrenreich, Phys. Rev. 120, 1951 (1960).

[18]F.A. Padovani and R. Stratton, Appl. Phys. Letters 13, 167 (1968).

[19]R.J. Archer and T.O. Yep, J. Appl. Phys. 41, 303 (1970).

[20]W.G. Spitzer and C.A. Mead, J. Appl. Phys. 14, 3061 (1963).

A N N E X E 2

Effects of an Ion Bombardment on the Characteristics of a Metal/n-GaAs Tunnel Contact*

P. Guétin and G. Schréder†
Laboratoires d'Electronique et de Physique Appliquée, 94-Limeil-Brévannes, France
(Received 24 June 1971)

Gallium arsenide surfaces have been submitted to low-energy ion bombardment. Metal/n-GaAs tunnel contacts realized on the surfaces prepared in this manner present features which depend greatly on the ion energy. At very low energy (50 eV) gas ions provide a "cleaning" of the interface and yield tunnel characteristics which are essentially identical to those of a vacuum-cleaved analogous contact. This technique may be used to define the origin of tunneling anomalies. Higher-energy bombardments (100–150 eV) lead to strong changes of the tunnel properties which can be summarized as a large resistance increase in spite of a strong barrier lowering and the appearance of inelastic processes. A model based on the creation of structural defects accounts qualitatively for all of the observed phenomena. Tunneling represents, therefore, a promising technique in the study of very-low-energy ion bombardments.

I. INTRODUCTION

Schottky diodes are commonly prepared by evaporating metal dots on a semiconductor surface which has previously been chemically etched and somewhat polluted by sitting at or near atmospheric pressure for a length of time. An effort towards desorbing unwanted species, such as water vapor, is often carried out by heating the wafer under vacuum. To our knowledge, the only satisfactory way of obtaining a "chemically clean" interface which has been used is the cleavage under vacuum in the stream of the evaporating material. This technique unfortunately involves quite a lot of technology and relatively large amounts of material which will rule out any massive use of the method for quite a while. Sophisticated cleaning procedures under ultrahigh vacuum present similar disadvantages.

This paper has been aimed at looking at the effects of an ion bombardment as an alternative way of making "cleaner" metal-semiconductor contacts under common vacuum, say 10^{-6} Torr. Gallium arsenide has been chosen because of the huge amount of data available, its cleaving ability, and its relatively low oxidation rate. More than an actual chemical cleaning of the interface, which might be impossible at such pressure, we hoped for a "cleaning" of the metal-semiconductor contact properties, i.e., a better agreement with theory or better performances. In the tunnel regime, such a contact can be expected to respond strongly to changes in the state of the surface and in the barrier parameters within a layer of 100 Å from the surface. The effects of the bombardment can be split in two.

First we present some evidence of a cleaning effect at very low ion energies (~ 50 eV). This is done by a comparative study of the tunnel properties of cleaved, "chemical," and bombarded analogous contacts. Second, we show the effects of a higher-energy ion bombardment. The tunnel differential resistance increases in spite of a strong barrier lowering, and anomalies typical of inelastic processes show up. Several independent experiments have been set up in order to determine the barrier parameters and to pin down the effects of the ion bombardment. A numerical computation has been used in the assessment of the different junctions and has helped us in testing a model which provides qualitative agreement with the experiments even though it leaves the question of the barrier lowering unanswered.

We present the different ways of making the metal-semiconductor contacts and some experimental details in Sec. II, the comparative results of a slight bombardment in Sec. III, the results of a heavy bombardment in Sec. IV, and a tentative model in Sec. V.

II. EXPERIMENTAL

Most of this work has been carried out on n GaAs:Te ($n = 5.4 \times 10^{18}$ cm^{-3}—Monsanto) and n GaAs:Si ($n = 5.8 \times 10^{18}$ cm^{-3}—MCP).

A. Chemical Junctions

Wafers are cut in the (111) and the (211) planes, lapped, and chemically polished in bleach. The quality of the polishing is always checked by x-ray topography. Ohmic contacts are taken by alloying tiny tin balls at 350 °C. The free surface is then etched in H_2SO_4, H_2O_2, H_2O 18:1:1 for 2 min and the sample is quickly inserted in the bell jar. Counterelectrodes are evaporated at 10^{-6} Torr. After removing the wafer from the vacuum system, the free semiconductor surface is covered with collodion, and the two thin silver wires are bound to the dots by a droplet of silver paste. Various crosschecks show that no spurious effect is brought up by this contacting procedure.

B. Ion-Bombarded Junctions

The same sequence of operations is followed down to the insertion in the bell jar. When the pressure reaches 10^{-6} Torr, a pure inert gas is introduced into the residual atmosphere up to a pressure of 10^{-4} Torr. The ionization of the gas atoms is ensured by a 1–2-mA/U = 100–150-V electron beam (Fig. 1). Since the extracting grid is grounded, the ions are created in the vacuum chamber at approximately the ground potential. The sample is polarized negatively with respect to the ground at the voltage F corresponding to the desired ion energy. The semiconductor sample collects about 1 μA/cm^2 and the duration is typically 1 min. The pumping is then resumed and the subsequent operations follow the usual pattern. Neon, argon, and krypton of high purity have been employed and extra care has been taken in order to improve the purity of the ion beam. Before introducing the inert gas, the electron gun and the extracting grid are outgassed for 10 min at 10^{-6} Torr by electron bombardment (6 mA/500 V). The electron gun fits into a copper container cooled with liquid nitrogen to minimize the outgassing during the bombardment. In this

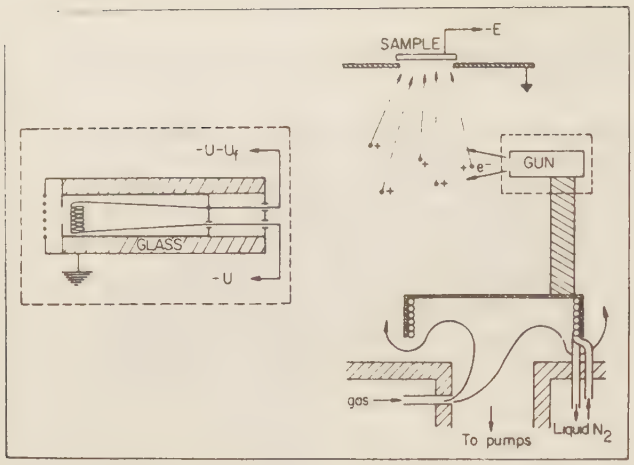


FIG. 1. Schematic view of the ion bombardment device.

manner, the spurious ion flux can be kept below a few percent of the inert ion flux. Additional purification of the gas is ensured by forcing it around a cryopump when entering the vacuum system.

C. Cleaved Junctions

The cleaving of GaAs bars is carried out in a bakeable high-vacuum system providing easily a 5×10^{-10}-Torr residual pressure: The Ohmic contacts on the side of the bar are made before insertion by evaporating and heating up a gold-tin alloy. The bar is cleaved along a (110) plane in the evaporation stream at a residual pressure $\leq 5\times10^{-9}$ Torr. Contacts on the dots are taken following the same procedure as described above.

D. Measurement Techniques

We plotted the differential resistance $R \equiv dV/dI$ and the conductance derivative d^2I/dV^2 against bias V using standard techniques. Tunnel measurements were made inside a shielded room with a cryostat equipped with complete magnetic shielding. When possible, the quality of the samples was checked by observing the superconducting density of states of the metal, otherwise the amplitude of the GaAs LO phonon structure was used for the same purpose. Where necessary, a 3-kG magnetic field was applied in order to keep the metal in the normal state.

Photothreshold measurements have been carried out in a double-pass spectrometer equipped with quartz prisms by shining light through the semiconductor less than ~150 μ thick. In spite of the extra work involved in the extraction of the barrier height from raw data, this technique has been chosen for the following reason: Shining the light from the metal surface requires an extremely small thickness of the metal dot, typically 150 Å. Such films cannot be easily trusted to be continuous and thus, a pollution of the interface might very well occur when the sample is brought into the atmosphere or when the Ohmic contact is made.

III. SLIGHT BOMBARDMENT

Taking vacuum-cleaved samples as "ideal" references, we define the slight-bombardment (SB) regime as follows: The SB regime is determined by the absence of extrastructure in the second-derivative curve for the best resolution ($\Delta R/R \lesssim 2\times10^{-4}$). For a particular material, the threshold energy to enter the "heavy" regime as defined here depends on the nature of the gas, most likely on its mass. The lighter the ion, the lower the energy threshold. We have operated most of these experiments at 50 or 60 eV.

Before turning to tunnel results, it might be useful at this point to give a few orders of magnitude of the physical effects of the bombarding ions. Neglecting ion and electron secondary emissions, we estimate the 50-eV total ion dose at 5×10^{14} cm^{-2}. The contrast loss of low-energy electron-diffraction patterns (LEED) after bombardment allows an estimate of the surface damage. On a semiconductor of similar elastic properties. Jacobson and Wehner[1] have measured that the number of surface atoms displaced per 50-eV incoming ion is about unity. We conclude as a rough guess that each surface atom will be perturbed once by the incoming ions. According to the literature,[2] one can expect a sputtering ratio of 0.1 which would lead in our case to an etching process taking off one-tenth of a monolayer of GaAs. This is why this soft treatment can only be limited at desorbing lightly adsorbed species and cannot be expected to break through an oxide layer. The ion-penetration depth[3] should be limited to the first two layers. Since the displacement energy of the lattice atoms is estimated at 25 eV, the ion impact may create crystalline defects even at 50 eV. These defects are expected to be localized to the same crystal region although collision chains have been shown to occur and room-temperature diffusion of defects cannot be ruled out. In conclusion, a 50-eV ion bombardment (SB) can hardly be expected to modify anything other than the surface properties.

We will compare the bombarded junctions to corresponding vacuum-cleaved ones taken as references and also to the results of the computation. We, therefore, begin by recalling a few results published previously[4] concerning these points.

A. Theoretical Model and Results

Only essential features of the computation will be repeated here together with typical results obtained on vacuum-cleaved samples.

We assume a homogeneous semiconductor and a perfect interface between both materials. The differential resistance is computed in a straight WKBJ approximation (no extra prefactor) with a parabolic barrier [Conley and Mahan's[5] $V_b'(z)$] and the Franz two-band model. The quadrature over the momentum parallel to the interface ($k_\parallel$) is carried out. The material parameters are chosen as follows: energy gap (0 °K), $E_g = 1.522$ eV; relative static dielectric constant, $\epsilon = 12.5$; effective mass (band edge), $m^* = 0.07m_0$; Fermi degeneracy, μ_F is the free-electron model corrected for nonparabolicity;[6] barrier height, v_b is the measured value; and doping level, N is the measured value. $V > 0$ (forward) corresponds to electron injection from the semiconductor into the metal and conversely for $V < 0$ (backward).

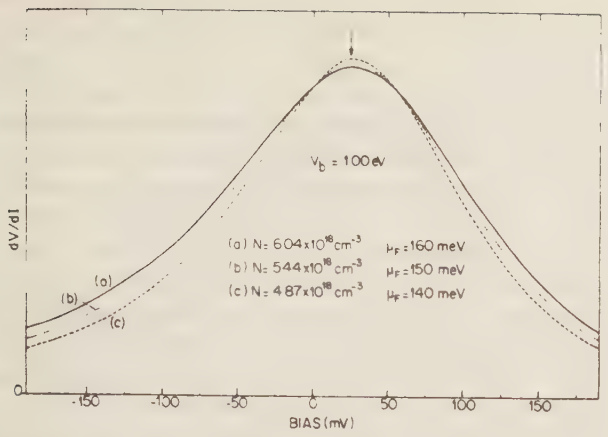


FIG. 2. Influence of the doping level on the differential resistance for a given barrier height. The arrow marks the position of the resistance maximum.

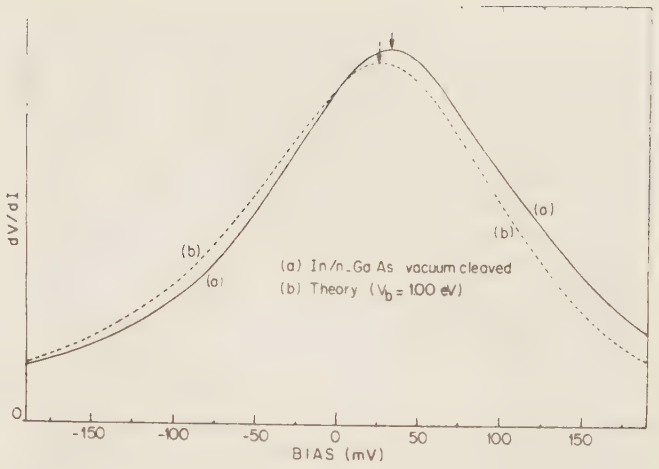


FIG. 4. Differential resistance vs bias voltage for an In/*n*-GaAs vacuum-cleaved contact (a) and corresponding computed curve (b).

The computation is, therefore, done *without* any *adjustable parameter*. For clarity, we present graphs in which all the resistance curves have been normalized at $V=0$.

Figures 2 and 3 show the influence on the background resistance of the doping level and the barrier height, respectively. The parameters of the computation are mentioned on the figures. Figure 2 shows that changing the doping level N does not drastically modify the background shape. The position of the resistance maximum V_{max} does not appreciably depend on N and the essential feature consists in a decrease of the over-all "curvature" $|dR_n/dV|$ at high bias when the doping level is increased. Figure 3 shows on the other hand that increasing the barrier height shifts V_{max} rather quickly. The rate $\Delta V_{max}/\Delta V_b$ can be estimated at 0.1. The main effect of a barrier increase can be summed up as an over-all shift of the curve towards higher forward bias.

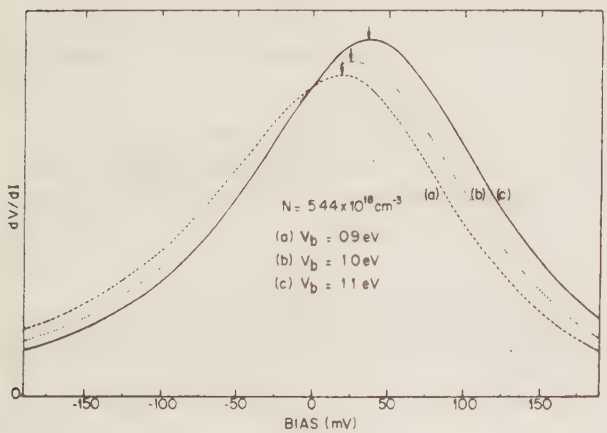


FIG. 3. Influence of the barrier height on the differential resistance for a given doping level and Fermi degeneracy. The arrows mark the position of the resistance maximum.

Therefore, these two parameters have very different typical behaviors and our previous results[4] on vacuum-cleaved samples are in good agreement with these calculations. Fig. 4 shows a typical comparison between theory and experiment (indium/*n* GaAs, vacuum cleaved). As we had outlined previously, the agreement is fair but there is a systematic discrepancy between theory and experiment. The experimental curve is always shifted toward the right of the computed one. A very good fit can be (arbitrarily) obtained at low bias (± 50 mV) by choosing a barrier height higher by 50 to 100 meV than the measured value. We have also shown[4] that the shape of the background sensitive to the form of the potential and, therefore, for our present purpose, we will satisfy ourselves with this fair agreement. In the following, we will consider the vacuum-cleaved junctions as references rather well understood at least on a relative basis. We now turn to the results obtained by different preparation means.

B. Chemical Junctions

We have made diodes by chemical etching and straight evaporation. Typical resistance curves are shown in Fig. 5 for gold and lead and two different doping levels. Curves (a) and (c) drawn for the highest doping level illustrate a clear discrepancy with theory; even though lead provides a lower barrier height than gold,[4] the lead curve (a) is shifted to the right of the gold curve (c). For the lower doping level, the situation is reversed and the lead curve (b) is now displaced to the left of the gold curve (c) consistently with the theory. Moreover, for both very different doping levels, gold diodes present the same V_{max} while lead ones obviously do not. The magnitude of these discrepancies increases with the reactivity of the metal and the doping level. The presence of the interfacial layer is clearly responsible for these inconsistencies. Not much else needs to be said about these junctions apart from the fact that second-derivative plots present, at high resolution and very low temperature (1 °K), many structures which do not reproduce from sample to sample.

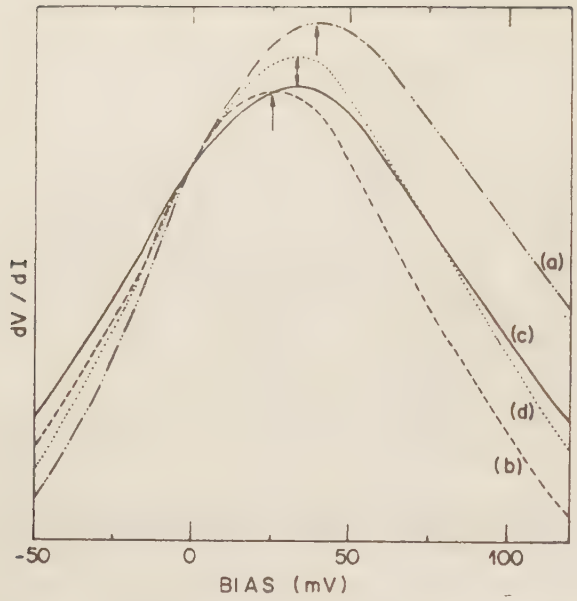


FIG. 5. Differential resistance vs bias voltage for chemically prepared Au/n-GaAs and Pb/n-GaAs contacts. For each metal, we use two different doping levels: (a) lead—5.4×10^{18} cm^{-3}; (b) lead—3×10^{18} cm^{-3}; (c) gold—5.4×10^{18} cm^{-3}; (d) gold—3×10^{18} cm^{-3}. The gold diodes, (c) and (d), present a resistance peak essentially independent of the doping level as expected. This is not the case of the lead diodes: The (a) curve presents a resistance maximum shifted towards high voltage by roughly 10 mV.

C. Slightly Bombarded Junctions

SB diodes have been made with gold, lead palladium, tin, and aluminum. The following differences from chemical junctions have been observed in a very reproducible way: the absolute value of the differential resistance tends to decrease; the resistance maximum V_{max} is shifted toward lower voltages; most (if not all) of the nonreproducible structures of the second-derivative curves disappear and the resolution is then essentially limited by noise at voltages up to ± 50 mV; no new second-derivative structure appears (by definition of the SB regime).

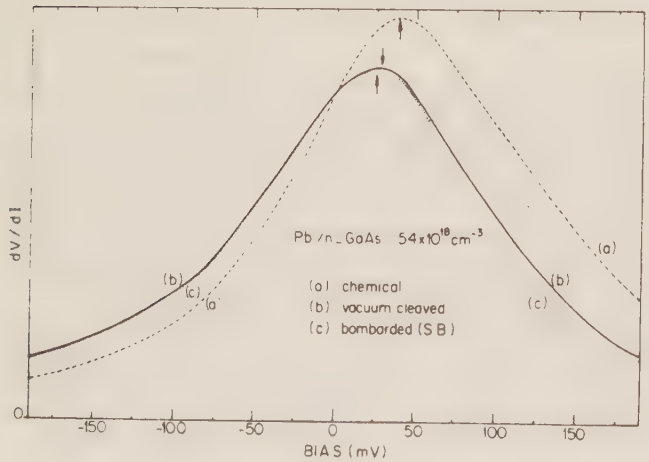


FIG. 6. Differential resistance vs bias voltage for Pb/n-GaAs contacts prepared by different methods.

Generally speaking, the slight bombardment improves the agreement with the characteristics of a cleaved junction. This statement can be best illustrated (Fig. 6) in the case of lead which appears to provide strong interface effects. The improvement from curve (a) is obviously mostly at forward bias, and SB and vacuum-cleaved samples appear practically identical. These general features lead us to conclude that an actual cleaning of the contact properties occurs. We believe that the essential function of such a bombardment consists in a partial desorption of lightly fixed impurities, especially water vapor, as suggested by what follows. Whereas the classical purely chemical procedure leads in the case of aluminum to a high-impedance MIS-type sandwich which ages rapidly, a slight ion bombardment provides us with low impedance and stable junctions thoroughly behaving as a reliable metal-semiconductor tunnel junction. We also succeeded in making such aluminum/n-GaAs tunnel contacts by heating the sample under vacuum up to 100 to 150 °C for a few minutes. These samples always turned out to show an unusually high noise level and nonreproducible d^2I/dV^2 tiny structures.

Compared to cleaved junctions, bombarded contacts present a noticeably larger spread of V_{max} and overall "curvature." V_{max} is commonly found to be lower by a few mV than for a cleaved junction, and this decrease is accompanied by a light curvature increase. In order to verify whether the barrier height is changed by a SB, we have carried out photothreshold measurements on the *tunnel samples themselves*. These measurements cannot be trusted to provide accurate absolute values of the barrier height[4] but represent an elegant way of detecting small barrier variations from sample to sample.

Table I gives for different samples the barrier change measured by the photothreshold method $\Delta V_b(\varphi)$ together with the experimental V_{max} shift (ΔV_{max}) for the corresponding samples. In the last column, we figure the value of the barrier height change ΔV_b^T which could be deduced from ΔV_{max} by assuming that the theory is still valid.

Clearly, as long as the barrier lowering remains small (say, 50 meV), this particular aspect of the characteristics is well accounted for by the theory.

Table I. Measured barrier lowering compared to the values obtained from tunnel measurements through the shift of the resistance maximum.

$\Delta V_b(\varphi)$ (meV)	ΔV_{max} (mV)	ΔV_b^T (meV)
< 20	< 2	< 20
20	2	20
40	5	20
50	6.5	65

Within the same limitations, the agreement with theory on a large voltage range (± 200 mV) is neither better nor worse than in the case of a vacuum-cleaved sample. Indeed, the very same systematic discrepancies show up (Fig. 6). Everything looks as if the SB would bring about only minor changes to the barrier which are essentially boundary conditions.

For the sake of tunneling, there is some obvious interest in this method. We have already said a word on the better resolution of the curves provided by this procedure. This can be illustrated by the regular appearance, when the metal is a superconductor (Pb), of the GaAs 2 LO phonon structure which other methods failed to show. We have been able to identify reproducible structures corresponding to $\Delta R/R \sim 2\times10^{-4}$.

The ability to modify the physics and chemistry of the interface appears to be of much more obvious interest than this performance-minded remark. This may lead one to the precise origin, or at least check proposed explanations of some anomalous behavior. We illustrate this point by two examples: The resistance peak zero-bias anomaly observed with paladium[7] does not resist a slight bombardment (Fig. 7) as reported elsewhere[8]; normal-state lead phonon structures[8] are reduced by the same treatment to the amplitude observed on vacuum-cleaved samples ($\Delta R/R \sim 5\times10^{-4}$).

This entire study shows that both these effects are very much influenced by the state of the interface or simply due to surface phenomena.

We conclude that, apart from a very small barrier lowering (typically 50 meV), the SB method provides very reliable contacts with resistance backgrounds quite equivalent to those of vacuum-cleaved ones. The second-derivative curves appear most reproducible, i.e., free of spurious structures and present the lowest noise level that we obtained by all other methods. SB appears to be an interesting cleaning technique since it can be easily and successfully carried out in a regular vacuum system ($\sim 10^{-6}$ Torr).

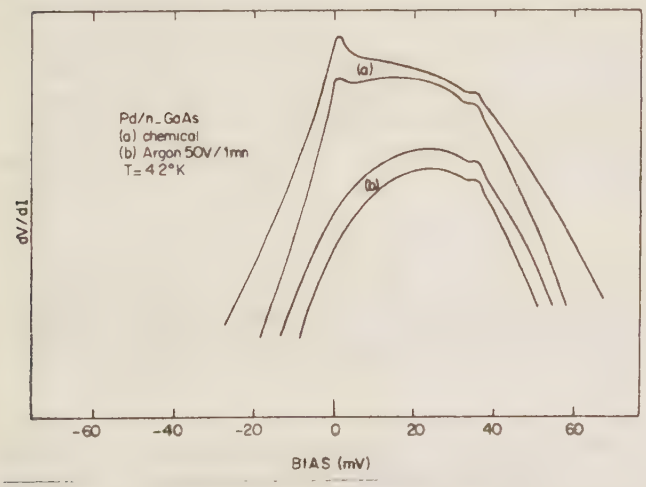


FIG. 7. Differential resistance vs bias voltage for Pd/*n*-GaAs contacts: (a) chemical preparation; (b) low-energy ion bombardment.

IV. HEAVY BOMBARDMENT

Throughout this entire work we have defined a heavy ion bombardment (HB) as one giving rise to a definite impedance increase and to the simultaneous appearance of reproducible antisymmetric structures on the d^2I/dV^2 curves. The energy of the ions was varied between 100 and 200 eV and the total dose was kept around 10^{15} ion/cm^2. Large energies yield highly resistive contacts where conductance mechanisms other than tunneling may not be discarded.

A. General Features

Generally speaking, for a given wafer, the junctions present a wider spread of resistance values than cleaved samples. This fact, in some respect, prevents us from drawing anything other than qualitative conclusions. This is not surprising since the exponential transmission coefficient acts as an "amplifier" for bombardment inhomogeneities. Such inhomogeneities can be explained by a nonuniformly polluted surface and the electrostatic charging of the surroundings.

The following trends, however, have shown up without ambiguity: At a given bias, the differential resistance increases with the bombardment energy and duration; the higher the impedance, the larger the "curvature" $|dR_N/dV|$; the amplitude of the "inelastic" structures increases with the resistance; a temperature-dependent zero-bias anomaly shows up as a local resistance dip; the amplitude of the GaAs LO phonon structure is altered.

Consistent with the above trends, we evaluate the local bombardment intensity by the value of the resistance at zero-bias $R(0)$. There is no particular reason why these quantities should be linearly coupled but everything looks as if they were both related monotonically in our domain of interest.

We will successively discuss the differential resistance, the off-zero second-derivative structures, and the zero-bias anomaly.

B. Differential Resistance

Heavy bombardments, as defined above, systematically give rise to resistance and "curvature" increases. In addition, the position of the resistance maximum V_{max} shifts toward zero bias whatever the metal and the bombarding gas. The higher the resistance, i.e., the bombardment intensity according to our convention, the larger the above three effects. The high spread in numerical values and the relatively narrow energy range in which reliable tunnel measurements are possible (100 eV $< E <$ 200 eV) do not allow a more quantitative assertion with respect to their dependence on the ion energy and total ion dose. To fix the idea, a 100-eV/1 mN argon bombardment frequently yields resistance values varying from diode to diode by a factor of 10 instead of 2 for cleaved samples. Krypton gives more reproducible values but neon is worse in this respect. Figure 8 is instructive since it shows on a single wafer all the situations which have been studied in this work.

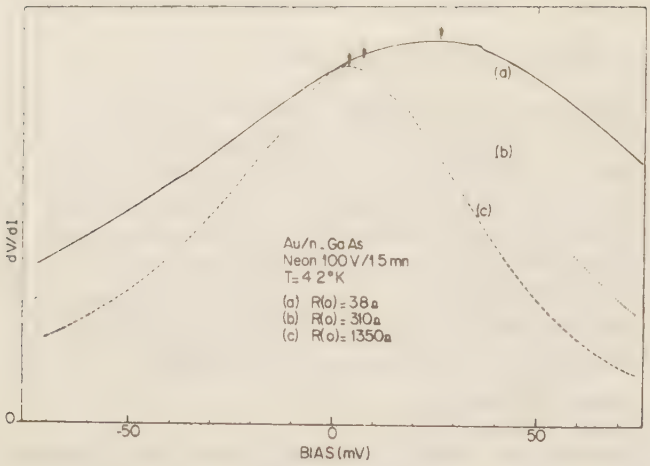


FIG. 8. Differential resistance vs bias voltage for heavily bombarded Au/n-GaAs contact. The unusually wide spread of the results illustrates on a single wafer all the situations encountered.

Curve (a) corresponds to a rather soft bombardment with the "normal" shape and resistance value as discussed in Sec. III. Curve (b) is a typical case of 100—150-eV bombardment. Curve (c) represents the extreme situation above which pure tunneling cannot be ascertained and where structures on second-derivative curves become nonreproducible and much too numerous to allow identification. The resistance values at zero bias are given in the inset and arrows mark the position of the resistance maximum.

Again, we have tried to relate the V_{max} shift to a barrier lowering. To do this, we have carried out photothreshold measurements on the tunnel sample themselves. The measured barrier lowering ΔV_b is now rather large. If we disregard corrections for image force and tunnel effective lowering of the photothreshold in the case of the highly bombarded junctions [Fig. 8(c)], we find that the barrier decreases down to ~0.75 eV at 77 °K; in other words, the Fermi level on these diodes tends to be pinned around midgap. The shift of the resistance maximum ΔV_{max} does not quite follow the theoretical dependence but remains roughly proportional to ΔV_b. This linear relationship between V_{max} and V_b is sufficient for our purposes.

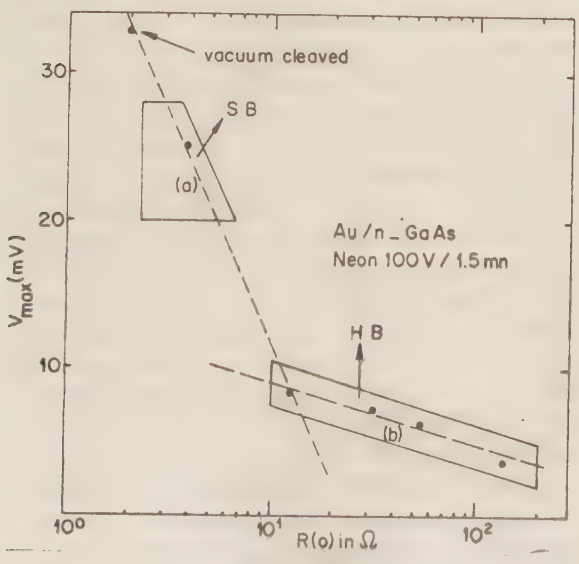


FIG. 9. Position of the resistance maximum vs the zero-bias resistance. Regions (a) and (b) represent typical results in the light and heavy bombardment regimes, respectively.

The dependence of V_{max} (or V_b) on $R(0)$ is illustrated by Fig. 9. The schematic regions (a) and (b) correspond to the SB and HB regimes, respectively. One can say qualitatively that, when the bombardment intensity increases from the SB regime, the barrier height is first reduced quickly without much resistance increase and next tends to stabilize near midgap while the resistance sharply goes up.

A surprising feature, of course, consists in the large resistance increase in spite of the strong measured barrier lowering. At least two phenomena can be put forward to explain this finding: different conductance mechanism and change in the nature or shape of the barrier. The new conductance mechanism has to be tunneling since all junctions made with lead, tin, and aluminum show the right superconducting behavior. Nonspecular tunneling is likely to occur since crystalline defects are obviously created. It is more difficult to admit, however, that this process alone could be responsible for the huge increase of resistance which can easily be obtained ($\times 10^3$). While scattering of tunneling electrons probably occurs, we believe that the main effect consists in the change of the nature or the shape of the barrier. If we assume that the above tunneling model still gives us at least orders of magnitude of the effective barrier parameters, we can obtain a good estimate of the *effective* doping value $\bar{N}$ from the "curvature" at reverse bias. In other words, we approximate the real barrier by a parabolic one of variable thickness. We will show in Sec. V that this method might have some relevance with the actual situation. From this effective doping value $\bar{N}$ and the measured barrier height we calculate $R_c(0)$ and compare it to the experimental value. The results are illustrated by Fig. 8 and Table II. In this example, we have disregarded small variations of V_b for diodes 2 to 5 since they are equal within 50 meV and since such barrier fluctuations do not change the computed resistance by more than a factor of 2. The reference junction is taken as a SB typical case where $R(0) \sim 20\ \Omega$, $\bar{N} \equiv N = 5.4 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$, and $V_b \sim 0.95$ eV. The results of Table II show that if it is true that the curvature increase is essentially due to a superficial change in the effective doping level, this effect is strong enough to overcome by far the consequence of the barrier lowering. This rough fit, of course, does not bring any new evidence of the validity of the model but confirms that all the first-derivative results are consistent with this picture. We will come back to this model in Sec. V.

Table II. Zero-bias resistance $R_c(0)$ of HB contacts computed for the measured barrier height V_b and the effective doping level estimated from the experimental curvature. $R(0)$ is the experimental resistance of the corresponding diode.

n_0 diode	V_b (eV)	$\bar{N}$ (10^{18} cm^{-3})	$R_c(0)$ (Ω)	$R(0)$ (Ω)
1(a)	0.85 ± 0.05	4.3	5.3×10^1	3.8×10^1
2	0.75 ± 0.05	3.0	3.2×10^2	1.25×10^2
3(b)	0.75 ± 0.05	2.7	1.0×10^3	3.1×10^2
4	0.75 ± 0.05	2.3	6.1×10^3	5.4×10^2
- -	0.75 ± 0.05	2.0	3.0×10^4	1.35×10^3

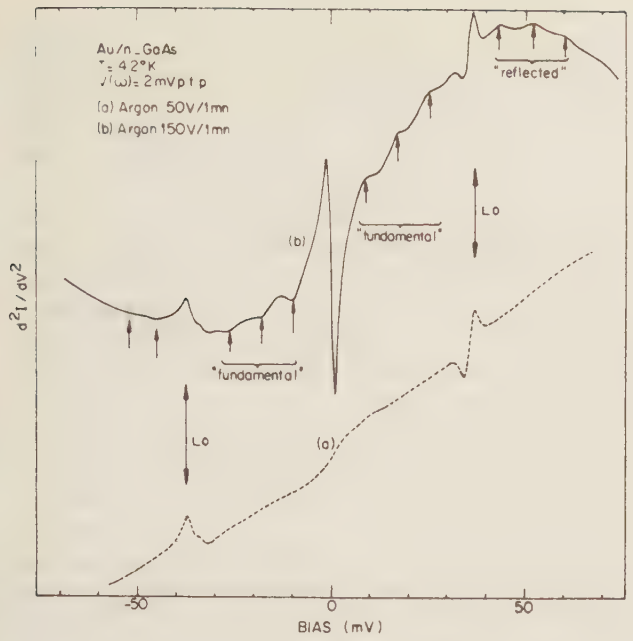


FIG. 10. Second-derivative curves vs bias voltage for two Au/n-GaAs contacts bombarded at different energies.

C. Off-Zero d^2I/dV^2 Structures

We observe two classes of new reproducible off-zero structures on the d^2I/dV^2 curves. We show in Fig. 10 typical results for a SB (a) and a HB (b). The essential features of curve (a) are two well-known LO phonon structures ($V \sim \pm 36$ mV); a smooth structure around ± 10 mV which appears for all metals[8]; a soft step around zero bias. Unlike lead, tin, and indium in the normal state, gold does not yield any measurable phonon structure related to the metal electrode. Curve (a) represents what we could call the "intrinsic" second derivative of a clean metal/n-GaAs tunnel contact, i.e., one in which the metal does not contribute any appreciable extra structure. Curve (b) shows the usual two LO phonon patterns, a zero-bias anomaly which will be discussed later and two classes of new structures. The first class groups the "fundamental" structures appearing between $V=0$ and $V=\pm\hbar\omega_{LO}$. The second class is made of the "reflected" structures occurring beyond $V=\pm\hbar\omega_{LO}$. This is a general observation as long as the bombardment does not become too strong. The 100–150-eV energy range turned out to be convenient since more energetic treatments resulted in the multiplication of bumps leading to problematic reproducibility and identification.

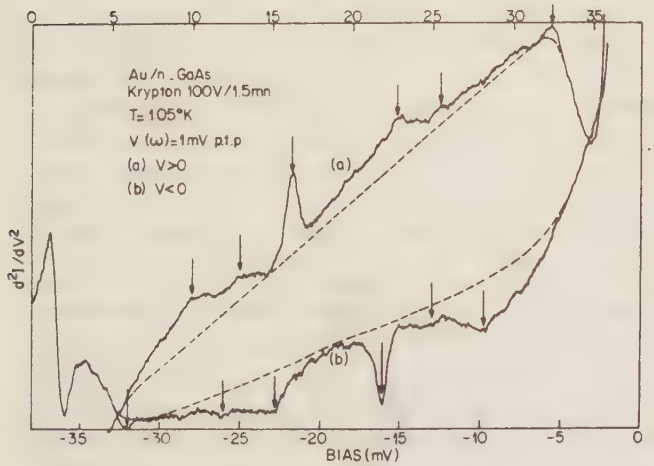


FIG. 11. Second-derivative curves vs bias voltage of a heavily bombarded Au/n-GaAs contact. Curve (a) corresponds to forward bias ($V>0$) and the top horizontal scale. Curve (b) corresponds to reverse bias ($V<0$) and the bottom horizontal scale.

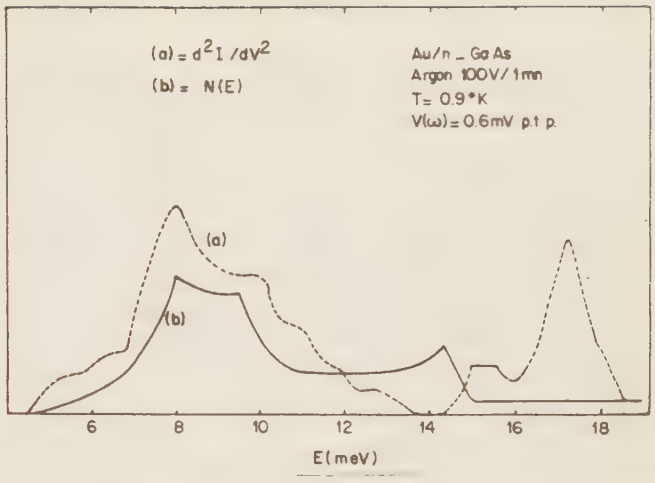


FIG. 12. Curve (a) represents the "inelastic" part of the d^2I/dV^2 curve vs bias voltage. Curve (b) is the phonon density of states of GaAs vs energy.

1. *Fundamental Structures*

These anomalies definitely correspond to symmetric conductance increases and therefore appear analogous to usual inelastic scattering phenomena.[9] Their precise shape may sometimes be slightly different at forward and reverse bias. Most of these structures depend upon the ion species but not on the metal or the impurity type (Si or Te). Figure 11 gives the "fundamental" spectrum at 1 °K for krypton. Curve (a) corresponds to forward bias and curve (b) to backward bias. The spectrum for argon is presented partially on Fig. 12 (forward) and Fig. 15 (backward). Neon, on the other hand, gives rise to two smooth and wide structures. Table III summarizes the position (± 0.2 mV) of the main peaks and their relative strength at 1 °K.

Table III. Energies of the fundamental d^2I/dV^2 structures. (s) and (w) stand for strong and weak, respectively.

Gas	Voltage of the peaks (mV)			
Neon	8—10 (s)	...	...	21—22 (s)
Argon	8—10.2 (s)	15 (w)	17.2 (s)	24.5 (w)—25.7 (s)
Krypton	8—10 (s)	13 (w)	16.2 (s)	22.8 (s)—25.5 (w)

The 8—10-mV peak is essentially gas independent and fits quite well the transverse accoustical phonon density of states of gallium arsenide[10] (Fig. 12). Apart from the small 26-mV structure, possibly due to the LA GaAs phonons, all the others vary with the ion species. Since the 8—10 mV peak always shows up on cleaved junctions, it seems that the ion bombardment amplifies the existing phenomenon. Bennet *et al.*[9] have devised a theory for incoherent phonon emission due to the presence of impurities. The resulting effect can be approximated by

$$\frac{d^2I}{dV^2} \sim N_b(V)\,|K(V)|^2.$$

The second derivative is then expected to reproduce the phonon density of states N_b modulated by a coupling term K^2. Figure 12 gives the second-derivative anomaly (dotted curve) after substraction of the usual background. Obviously the 15—17-mV peak (argon) cannot be accounted for by the GaAs spectrum.

Since we have adopted the convention of "measuring" the bombardment power by the value of $R(0)$, we plot the intensity $\Delta R/R$ of different peaks (A and B vs $R(0)$ for a given wafer. Figure 13 shows that their strength increases with $R(0)$ and that for a given $R(0)$, i.e., bombardment intensity, both structures have proportional amplitudes. This suggests that they are both due to closely related phenomena. Even though their origin is not known[11] we tentatively attribute them to vibronic modes of some defect or impurity complex. The inelastic structures appear when the ion energy is high enough to produce crystalline defects in the lattice.[3] Their frequencies depend on the ion species but the nature of the dopant (Si or Te) has no influence on them. We, therefore, infer that the simplest complex which could account for the experimental data involves at least one crystalline defect (vacancy or interstitial) and one gas atom.

Vibronic modes of similar origin and energies have been observed by photoluminescence.[12,13]

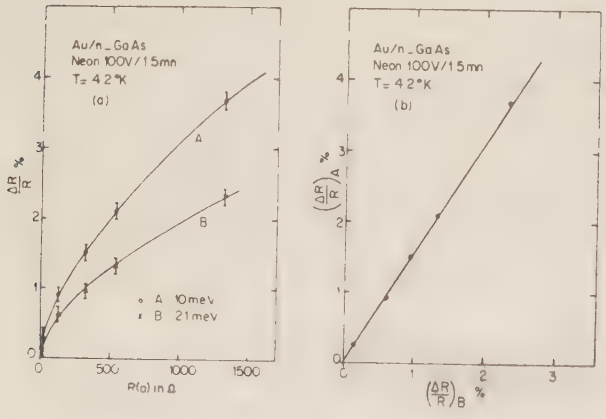


FIG. 13. (a) Plot of the amplitude of two inelastic structures, A and B, vs zero-bias resistance (given wafer); (b) plot of the amplitude of A vs the amplitude B.

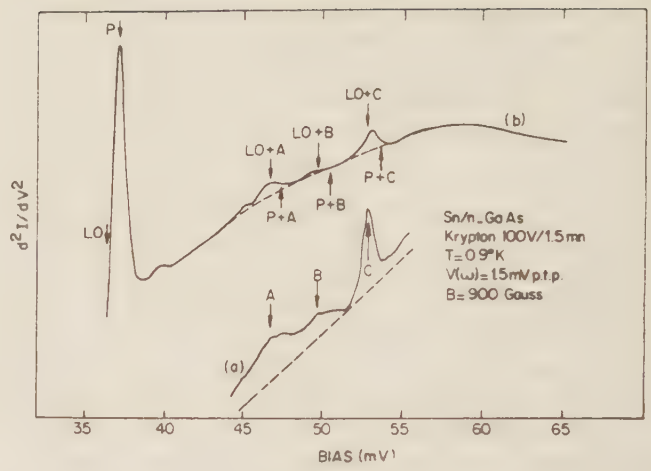


FIG. 14. Second-derivative curves of a bombarded Sn/*n*-GaAs contact showing the fundamental and the reflected anomalies for forward bias. The background is represented by broken lines. Curve (a) corresponds to the fundamental spectrum shifted to

2. *Reflected Structures*

Beyond the GaAs LO phonon structure, we find peaks or dips at voltages corresponding to the sum of the LO phonon energy and the energies (A, B, C, . . .) of the fundamental structures. We have, therefore, named them reflected. The resolution and reproducibility are such that we should be able to identify the first two reflected peaks without ambiguity. In the discussion of the reflected structures, P (P') stands for the voltage of the major d^2I/dV^2 peak of the optical phonon structure at forward (backward) bias. P is different from P' and arrows mark their respective position on Figs. 14 and 15. In both figures, the fundamental and the reflected spectra have been shifted with respect to one another by the same constant voltage (35.4 mV) which provides the best fit between both spectra at forward *and* backward bias. The LO arrows mark this particular voltage which corresponds to the relevant optical phonon involved in the reflection process. Figure 14 shows that the pattern beyond the LO peak is a faithful replica of the low-energy fundamental spectrum and is quite unlikely to constitute in itself a fundamental spectrum made of high-energy vibrations.

Looking more closely at these reflected structures, however, reveals several puzzling features related to their energy position, symmetry, and amplitude. Indeed, one could expect that the inelastic current is modulated by the electron—LO-phonon interaction in the same way as the inelastic current is. The model presented in Appendix A predicts that the reflected peak should be separated from the d^2I/dV^2 LO peak P by exactly the energy of the fundamental structure:

fundamental A, B, C, . . . , reflected $P+(A, B, C, \ldots)$. Moreover, since the LO structure is essentially odd (conductance) and the fundamental one definitely even, their convolution should be odd, i.e., of the same symmetry as the LO anomaly. Finally, the amplitude ratio of the reflected to the fundamental inelastic peaks should be roughly equal to $\Delta R(\mathrm{LO}/R(\mathrm{LO})$, i.e., about 1%. Our experiments show that these three aspects are well confirmed by the reflection of the superconducting density of states. The reflected inelastic structures, on the other hand, do not follow this pattern. The amplitude ratio can reach 0.2; the symmetry is even (Fig. 15), i.e. that of the fundamental ones; and their energies are always found too small by about 1 meV. This is illustrated in Figs. 14 and 15 by the fact that the $P+X(P'+X)$ arrows regularly sit on the right (left) of the corresponding reflected peak (dip) at forward (backward) bias. One can conclude that either we are misled by the striking resemblance of the reflected peaks with the fundamental ones and one should consider the peaks beyond the LO phonon as fundamental ones, or we have to admit that the "reflection" process is more complex and probably involves a strong real emission of 35.4-meV optical phonons.

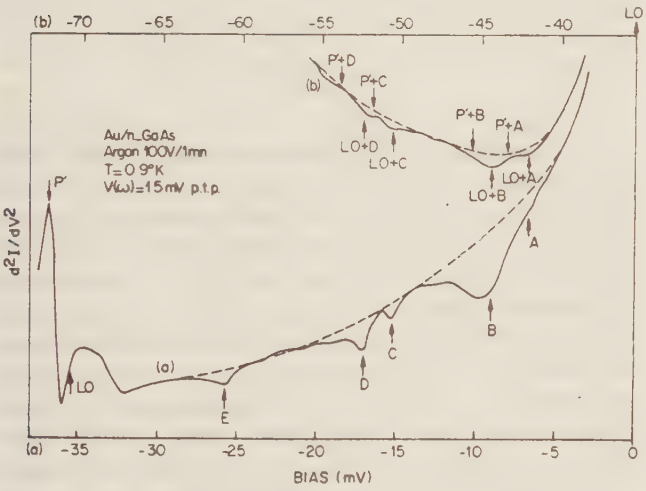


FIG. 15. Second-derivative curves of a bombarded Au/*n*-GaAs contact showing the fundamental and the reflected anomalies for reverse bias. The background is represented by dashed lines. Curve (a) corresponds to the fundamental structures and the bottom horizontal scale. Curve (b) has been shifted by 35.4 mV (LO) to the right (top horizontal scale). Arrows on curve (b) mark the computed energies corresponding to each structure reflected either by the relevant LO phonon or by the peak of the LO structure (P').

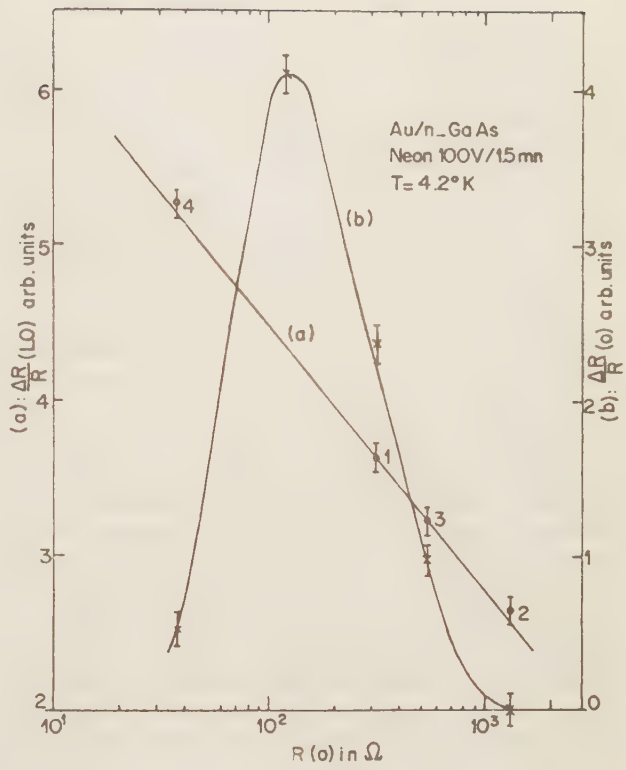


FIG. 16. Curve (a) shows the amplitude of the zero-bias anomaly vs resistance—right vertical scale. Curve (b) shows the amplitude of the LO phonon structure vs resistance—left vertical scale.

3. LO *Phonon Structure*

When the resistance $R(0)$ increases, the LO phonon structure is depressed. Figure 16(a) is a plot of the amplitude of the forward peak vs log $R(0)$. The main conductance mechanism at the corresponding bias is still tunneling since the superconducting density of states is reflected by the depressed LO structure (lead and tin). Apart from this weakening, we found no evidence for a change of line shape. Again, we cannot conclude whether this depression is due to nonspecular tunneling or to a change in the nature or the shape of the barrier. Before turning to the zero-bias anomaly we should also mention that the energy of the reported plasmon structures[14,15] is not influenced by a strong ion bombardment.

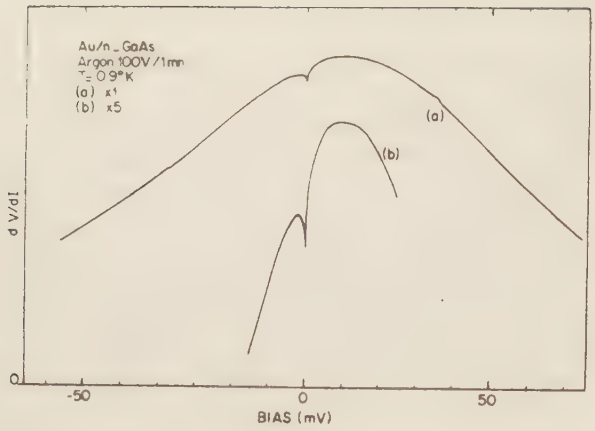


FIG. 17. Resistance curve of a bombarded contact showing the zero-bias anomaly.

D. Zero-Bias Anomaly

Figure 17 shows the resistance dip measured at the lowest temperature available. It is typically of a few percent and its dependence on the contact resistance is illustrated in Fig. 16(b) for a specific case. The amplitude of the anomaly goes through a peaked maximum when the bombardment increases. For a given diode, the zero-bias amplitude $\Delta R(0)/R(0)$ varies as $-\log(T/T_0)$, where T_0 is typically 25 °K. Its behavior reminds us very much of a now-well-known magnetic anomaly of the Appelbaum-Anderson type.[16] Since it already shows up at the edge of the SB regime together with a slight barrier lowering (~ 100 meV) and before measurable inelastic structures appear, we believe that the relevant process occurs preferentially at the interface. A chemical impurity cannot be trusted to be responsible for this anomaly because its appearance and strength are only controlled by the bias voltage of the sample during the bombardment. Since this is found for the three inert gases and all metals used in these experiments, we propose that the zero-bias anomaly is due to surface defects induced by the bombardment. More work will be done at low temperature (≤ 1 °K) and high magnetic field in order to check whether or not they can be given a magnetic origin.

V. MODEL

We have already seen that the relevant transport mechanism is tunneling and discussed why nonspecular tunneling alone is not likely to induce the observed strong effects.

Our model is based upon a change in the nature and the shape of the barrier due to the more-or-less heavy creation of crystalline defects by the impinging ions. LEED experiments[1] have shown that for a similar material, the energy threshold leading to a contrast loss, i.e., lattice disorder, was about 50 eV. Above this threshold, for a sufficiently large ion dose ($\geq 10^{15}$ cm^{-2}) the LEED pattern blurs out. According to the literature,[3] one can consider that the semiconductor presents an amorphous region extending to a few layers from the surface. Other experiments[17,18] tend to show that radiation damage produces semi-insulating layers.

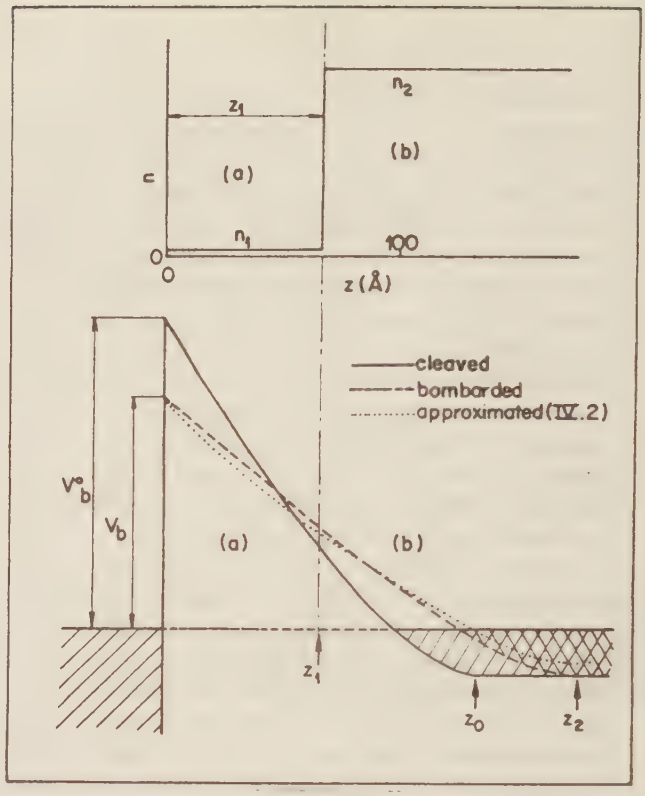


FIG. 18. Model of a bombarded barrier for a schematic doping distribution represented on the top of the figure. The full line corresponds to the "perfect" cleaved barrier and the broken one to the bombarded contact. The dotted line illustrates the kind of approximation made in Sec. IV B. Region (a) is partially compensated. Region (b) corresponds to the unperturbed single crystal.

At low energy, the defects should be Frenkel pairs[3] more or less spaced. The number of defects created per incoming ion is related to the energy: $\nu \sim E/2E_{th}$. E_{th} is the Ga or As displacement energy, which is typically 25 eV. We expect our "heavy" bombardment to produce about 5×10^{15} defect/cm^2, i.e., an amorphous layer 20 to 30 Å deep. Beyond this layer, isolated defects may exist. The above tunneling results show that, apart from a partial cleaning of the interface, only a few minor changes are produced. The barrier height is slightly decreased (50 meV typically) and, if present, the zero-bias anomaly remains very small. Its amplitude increases with the barrier lowering. The resistance curvature also is very slightly enhanced. In this bombardment regime, the resistance curve reproduces very closely the characteristics of analogous vacuum-cleaved junctions. Therefore, we conclude that there is an energy threshold (~50 eV for argon) below which nothing is changed in the barrier except the boundary conditions (adsorbed impurities and barrier height). Around this threshold, surface defects start being created and we believe they are responsible for the slight barrier lowering and the vanishingly small zero-bias anomaly. As the ion energy and dose increase, the first few layers become more and more disordered and defects are created more deeply. The barrier height keeps decreasing and tends to stabilize around midgap without regard to the metal or the gas. The stabilization of the Fermi level at the interface is not surprising since when a couple

of layers can be considered as amorphous, further bombardment should not much change the interface properties. In the amorphous layer it is likely that the impurities (Te or Si) lose their donor character and that an effective compensation occurs. Far from the surface, the semiconductor will be unaltered and the transition region can be pictured as a single crystal containing a continuously variable concentration of defects or traps. In Appendix B, we calculate the barrier shape in the presence of a schematic compensated layer and Fig. 18 illustrates a particular situation. The solid line corresponds to a vacuum-cleaved sample and the dashed one to a heavily bombarded junction. The latter barrier can still be approximated by a parabolic barrier with a lower doping level ($\bar{N}$ of Sec. IV B). This crude model provides a simple picture of the barrier shape and allows an estimate of the thickness of the compensated layer. We find, for the thickness z_1 of the compensated layer,

$z_1 < 25$ Å for $E = 50$ eV (SB),

50 Å $< z_1 <$ 100 Å for $100 < E < 150$ eV (HB).

This model implies a compensation extending deeper than the expected projected range of the ions and is, therefore, in good agreement with the results of Hunsperger *et al.*[18] Second-derivative features may be explained along the same model. The zero-bias anomaly goes through a peaked maximum and decreases quickly when the barrier height approaches the midgap value. This is consistent with our picture of a change in the nature of the surface. For light bombardment one can describe it as a crystalline surface with a small increasing number of structural defects and for the heaviest regimes as a rather stable amorphous layer. The centers responsible for the "magnetic" anomaly may have lost their character in the process. Off-zero inelastic structures do not come from interactions at the very interface since they only show up in the heavy regime with an amplitude which increases linearly with $R(0)$ in first approximation. As discussed previously, we attribute them to vibronic modes of a defect complex involving at least one gas atom. Their rather sharp energy definition suggests that they occur in the transition region. The depression of the LO phonon structure can also be interpreted by this barrier model.

This tentative model is consistent with our observations in all respects, but other solutions to the problem may exist. More work is needed in order to charterize the nature of the defects, their spatial distribution, and their influence on the local doping level. The main problem consists in the characterization of the rather thin perturbed layer which requires high-sensitivity methods.

VI. CONCLUSIONS

This paper has shown that it is possible to obtain a satisfying cleaning of the metal/semiconductor interface by carrying out a low-energy ion bombardment even under mediocre vacuum conditions. Such a clean contact is essentially identical to a vacuum-cleaved sample. Only minor side effects show up.

A stronger bombardment regime provides both background changes in the tunnel characteristics and inelastic tunneling as well. The tunnel behavior and the barrier is increased by the treatment. Radiation damage can account for the experimental observations but the exact mechanisms of barrier lowering and superficial compensation are not clearly understood at present. We have shown that tunnel metal-semiconductor contacts react strongly to relatively soft surface treatments.

We believe that tunneling may become a fruitful and very sensitive method of studying very-low-energy ion bombardment for which very few other methods of investigation keep enough resolution and sensitivity. More sophisticated conditions of vacuum and ion bombardment and systematic work might allow the determination of low-energy bombardment properties related to thresholds for defect creation, vibronic modes, spatial distribution of defects, magnetic properties, and annealing behavior.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank Professor E. Guyon for his constant interest in this work and J. P. Hurault for fruitful discussions. Miss Nelson-Pautier and R. Duchesne are gratefully acknowledged for their skillful technical help.

APPENDIX A: Reflection model

This phenomenological model is based on the well-known expressions of the elastic and inelastic tunnel currents in the standard notations.[15]

A. Superconducting Density of States

When electron-phonon interactions occur in the semiconductor and if the electrode is superconducting, the elastic tunnel current can be expressed by

$$J_e^s(V) \sim \int_{-V+\Delta}^{0} d\epsilon\, g(\epsilon)\rho_s(\epsilon+V)/\rho_N\pi, \qquad \text{(A1)}$$

where

$$g(\epsilon) \equiv \int_{-\mu_F}^{\infty} d\xi_k \operatorname{Im} G^R(\xi_k, \epsilon) \int_0^{\epsilon_k + \mu_F} dE_{\parallel} D(E_{\parallel}, \epsilon)$$

and where the BCS superconducting density of states is written

$$\rho_s(x)/\rho_N \begin{cases} = 0 & \text{for } |x| \le |\Delta| \\ = |x|/(x^2-\Delta^2)^{1/2} & \text{for } |x| > |\Delta|, \end{cases}$$

Δ is the algebraic half-gap. For simplicity, the explicit dependence of the transmission coefficient D on the bias voltage V has been neglected.

When the metal is in the normal state we have

$$J_e^N(V) \sim \int_{-V}^{0} d\epsilon\, g(\epsilon)/\pi, \tag{A2}$$

$$G_e^N(V) = dJ_e^N(V)/dV \sim g(-V). \tag{A3}$$

Since the LO phonon structure shows up essentially as a sharp conductance increase (forward bias) at $V = \hbar\omega_{LO}$, we neglect the dependence of the background conductance on the bias and assimilate the LO structure to an ideal step of amplitude A.

$$g(-V) \sim g_0 + A\theta(V - \hbar\omega_{LO}). \tag{A4}$$

It becomes

$$G_e^N(V) \sim g_0 + A\theta(V - \hbar\omega_{LO}) \tag{A5}$$

$$G_e^0(V) \sim g_0\rho_s(V)/\rho_N + A\theta(V - \hbar\omega_{LO} - \Delta)\rho_s(V - \hbar\omega_{LO})/\rho_N.$$

We find the usual result that the LO phonon structure is shifted by the half-gap Δ towards high voltage and is modulated by the superconducting density of states.

If the latter presents a LA phonon anomaly (lead, for example) we can write

$$\rho_s(V) \sim \rho_{BCS}(V) + \partial\rho\ \theta(V - \hbar\omega_{LA} - \Delta). \tag{A6}$$

With the help of (A5) and (A6) we can calculate the absolute and relative changes of conductance due to the fundamental and reflected LA structures;

$$\begin{aligned} \partial G_e^s(f) &\sim g_0\,\partial\rho\ \theta(V - \hbar\omega_{LA} - \Delta) \quad \text{fundamental} \\ \partial G_e^s(r) &\sim A\,\partial\rho\ \theta(V - \hbar\omega_{LO} - \hbar\omega_{LA} - \Delta) \quad \text{reflected} \end{aligned} \tag{A7}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_e^s(f)}{G_e^N} &\sim \frac{\partial\rho}{\rho} \text{ at } V = \hbar\omega_{LA} + \Delta \\ \frac{\partial G_e^s(r)}{G_e^N} &\sim \frac{A\,\partial\rho}{g_0\rho} \text{ at } V = \hbar\omega_{LO} + \hbar\omega_{LA} + \Delta. \end{aligned} \tag{A8}$$

This set of equations allows us to predict the respective energy position, the symmetry, and the amplitude of the reflected structure with respect to the fundamental one. The fundamental LA phonon structure should be found at $V = \hbar\omega_{LA} + \Delta$ and the reflected one at $V = \hbar\omega_{LO} + \hbar\omega_{LA} + \Delta$. Since $\partial\rho$ is even (conductance) and A essentially odd, the fundamental LA structure should be even and the reflected one odd, i.e., of the same symmetry as the LO phonon anomaly.

The amplitude of the reflected LA structure can be expressed as

$$\frac{\partial G_e^s(r)}{G_e^N} \sim \frac{\partial G_e^s(f)}{G_e^N}\,\frac{\partial G_e^N(\hbar\omega_{LO})}{G_e^N(\hbar\omega_{LO})}\,. \tag{A10}$$

Since $\partial G_e(\hbar\omega_{LO})/G_e(\hbar\omega_{LO})$ in the normal state is approximately 1% (forward) at 4.2 °K, one would expect a reflected LA structure a hundred times smaller than the fundamental one.

These above three aspects predicted by the phenomenological model are very well confirmed by the experiments (lead or tin).

B. Inelastic Structures

We assume that the transmission integral $g(\epsilon)$ for inelastic tunneling has the same form as for elastic tunneling. For simplicity, we assume that the vibronic spectrum is discrete $\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0)$ with strength $V(\omega_0)$ and $T = 0$ °K. Following Duke,[16] one can express the inelastic current as

$$\partial J_i(V) \sim N \int_{-V}^{0} d\epsilon\, g(-\epsilon)\theta(V + \epsilon - \hbar\omega_0)\,|V(\omega_0)|^2. \tag{A10}$$

The straightforward computation analogous to the previous one leads to the following results for the fundamental and the reflected inelastic structures (metal in the normal state):

$$\begin{aligned} \partial_1 G_i(\hbar\omega_0) &\sim N|V(\omega_0)|^2 G_e(0), \quad \text{fundamental} \\ \partial_2 G_i(\hbar\omega_{LO} + \hbar\omega_0) &\sim N|V(\omega_0)|^2\,\partial G_e(\hbar\omega_{LO}), \quad \text{reflected.} \end{aligned} \tag{A12}$$

This set of formulas yields very similar results as mentioned before in the case of the superconducting density of states. The inelastic conductance is modulated by the local change of the elastic conductance. The reflected structure should appear at $V = \hbar\omega_{LO} + \hbar\omega_0$. Since the inelastic anomaly is even (conductance) and the LO one essentially odd, $\partial_2 G_i(\hbar\omega_{LO} - \hbar\omega_0)$ should be odd, i.e., of the symmetry of the LO structure. Neglecting the smooth variation of the background conductance, we can express the amplitude as

$$\frac{\partial_2 G_i(\hbar\omega_{LO} + \hbar\omega_0)}{G_e} \sim \frac{\partial_1 G_i(\hbar\omega_0)}{G_e}\,\frac{\partial G_e(\hbar\omega_{LO})}{G_e(\hbar\omega_{LO})}\,. \tag{A12}$$

Again the reflected structure should be about a hundred times smaller than the fundamental one. As discussed in Sec. IV C none of these aspects is accurately confirmed by the above experiments.

APPENDIX B: Model of an inhomogeneous barrier

We assume a doping inhomogeneity of the following form:

$$\begin{aligned} n(z) &= n_1(z) \quad \text{for } 0 \le z \le z_1, \\ n(z) &= n_2(z) \quad \text{for } z \ge z_1. \end{aligned} \tag{B1}$$

This model corresponds to a partially compensated layer of thickness z_1 at the semiconductor surface (Fig. 18). For simplicity, we neglect the influence of free carriers. At $z = z_1$ the electric field is taken as continuous. Solving the Poisson equation leads to

$$V(z)=\tfrac{1}{2}Az^2n_1+Az_1(n_2-n_1)z-An_2z_2z + V_b+\mu_F \quad 0\le z\le z_1, \tag{B2}$$
$$V(z)=\tfrac{1}{2}A(z-z_2)^2n^2, \quad z\ge z_1,$$

where A is a constant, V_b is the barrier height, μ_F is the Fermi degeneracy, and

$$z_2=[z_1^2(1-n_1/n_2)+2(V_b+\mu_F)/An_2]^{1/2},$$

z_2 is the thickness of the depleted region.

If $n_1\le\frac{1}{10}n_2$ we obtain

$$V(z)\sim An_2(z_1-z_2)z+V_b+\mu_F, \quad 0\le z\le z_1$$
$$V(z)\sim\tfrac{1}{2}An_2(z-z_2)^2 \qquad z\ge z_1 \tag{B3}$$

with

$$z_2=[z_1^2+2(V_b+\mu_F)/An_2]^{1/2}.$$

Figure 18 illustrates a particular case.

The unperturbed potential can be expressed as

$$V(z)=\tfrac{1}{2}An_2(z-z_0)^2$$
$$z_0=[2(V_b^0+\mu_F)/An_2]^{1/2}. \tag{B4}$$

z_0 is the thickness of the depleted region for an ideal contact (vacuum cleaved) with the barrier height V_b^0. The barrier is lowered by the bombardment so that

$$V_b=V_b^0-\Delta V_b \quad \Delta V_b>0. \tag{B5}$$

A *necessary* condition for a resistance increase in spite of the barrier lowering can be stated by arguing that the width z_2 of the perturbed barrier must be at least equal to the original width z_0:

$$z_2=z_0[1-\Delta V_b/(V_b^0+\mu_F)+(z_1/z_0)^2]^{1/2}\ge z_0,$$

i.e.,

$$(z_1/z_0)^2\ge\Delta V_b/(V_b^0+\mu_F). \tag{B6}$$

For each (measured) barrier lowering, we can calculate a lower limit for the thickness of the compensated layer z_1. In the SB regime (50 eV) we have found $\Delta V_b\sim 50$ meV, i.e., $\Delta V_b/V_b^0\sim 5\times10^{-2}$, with a slight resistance decrease.

This computation shows that the amorphous or compensated region must not exceed about 25 Å.

The heavy bombardment regime yields barrier height of 0.85 eV down to 0.75 eV. Since resistance increases are observed in this regime, one can conclude along this model that the compensated region must be at least 40 to 50 Å thick.

We could, of course, compute more accurately the tunnel resistance of such a barrier and obtain the value of z_1 by fitting the computation to the experimental curve. Since we are only interested in orders of magnitude, it is sufficient to fit the experiment by using N as an adjustable parameter as performed in Sec. IV B. The effective doping level $\bar{N}$ gives us an estimate of the depleted region (z_2) which allows us to determine roughly z_1. In this manner, values of z_1 ranging from 50 to 100 Å are obtained.

*Work supported by the Direction des Recherches et Moyens d'Essais.

†Work based in part on a "Docteur es-Sciences" thesis to be presented at the University of Paris, 1971/1972.

[1]R.L. Jacobson and G.K. Wehner, J. Appl. Phys. 36, 2674 (1965).
[2]J. Comas and C.B. Cooper, J. Appl. Phys. 37, 2820 (1966).
[3]G. Carter and J.S. Colligon, *Ion Bombardment of Solids* (Heinemann Educational Books, London, 1968).
[4]P. Guétin and G. Schréder, J. Appl. Phys. 42, xxxx (1971).
[5]J.W. Conley and G.D. Mahan, Phys. Rev. 161, 681 (1967).
[6]H. Ehrenreich, Phys. Rev. 120, 1951 (1960).
[7]P. Thomas and H.J. Queisser, Phys. Rev. 175, 983 (1968).
[8]P. Guétin and G. Schréder, Solid State Commun. 8, 291 (1970).
[9]A.J. Bennett, C.B. Duke, and S.D. Silverstein, Phys. Rev. 176, 966 (1968).
[10]G. Dolling and R.A. Cowley, Proc. Phys. Soc. (London) 88, 463 (1966).
[11]Resonant elastic tunneling via an impurity is unlikely to yield sharp structures since the energy of these resonant states depends on their position in the junction. Inelastic tunneling involving the excitation of electronic transitions in the impurity or lattice defect (with a possible subsequent radiative deexcitation) cannot be ruled out; the observed energies, however, appear quite small for such electronic transitions.
[12]E.W. Williams, Phys. Rev. 168, 922 (1968).
[13]C.J. Hwang, Phys. Rev. 180, 827 (1969).
[14]D.C. Tsui, Phys. Rev. Letters 22, 293 (1969).
[15]C.B. Duke, M.J. Rice, and F. Steinrisser, Phys. Rev. 181, 733 (1969).
[16]See, for example, C.B. Duke, *Tunneling in Solids* (Academic, New York, 1969), pp. 156 and 162.
[17]A. Foyt, W. Lindley, J. Donnelly, and C. Wolfe, Solid-State Electron. 12, 209 (1969).
[18]R.G. Hunsperger, O.J. Marsh, and C.A. Mead, Appl. Phys. Phys. Letters 13, 295 (1968).